

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

**PROCESOS DE VARIOS CUERPOS EN REACCIONES  
POSITRÓNICAS**

**Francisco Navarrete**  
**Doctorando**

**Dr. Raúl O. Barrachina**  
Director

**Miembros del Jurado**

Dr. Sebastián Otranto (Universidad Nacional del Sur)  
Dr. Carlos Roberto Garibotti (Instituto Balseiro-Universidad Nacional de Cuyo)  
Dr. Victor Hugo Ponce (Instituto Balseiro-Universidad Nacional de Cuyo)

División Física Atómica, Molecular y Óptica  
Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro  
Universidad Nacional de Cuyo  
Comisión Nacional de Energía Atómica  
Argentina

a Ale

# Índice de contenidos

<b>Índice de contenidos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vi</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Tratamiento clásico de colisiones atómicas</b>	<b>4</b>
1.1. Átomo hidrogenoide . . . . .	4
1.2. Descripción del proceso de colisión . . . . .	5
1.3. Método de trayectorias clásicas de Monte Carlo . . . . .	5
1.4. Condiciones iniciales . . . . .	7
1.4.1. Preparación del blanco . . . . .	7
1.4.2. Preparación del proyectil . . . . .	8
1.5. Resolución de las ecuaciones de movimiento . . . . .	10
1.5.1. Coordenadas de Jacobi . . . . .	10
1.5.2. Dinámica en coordenadas de Jacobi . . . . .	12
1.6. Clasificación del estado final . . . . .	14
1.7. Sección eficaz en colisiones de ionización . . . . .	15
1.8. Reducción de la dimensionalidad . . . . .	16
<b>2. Resultados mediante el método CTMC</b>	<b>18</b>
2.1. Resultados numéricos para el problema sin restricciones . . . . .	18
2.1.1. Determinación numérica del máximo parámetro de impacto . . .	19
2.2. Sección eficaz para el problema sin restricciones . . . . .	19
2.2.1. Límite cinemático del espacio de momentos . . . . .	20
2.2.2. Pico de electrones blandos . . . . .	22
2.2.3. Orientación . . . . .	23
2.3. Resultados numéricos en la geometría colineal . . . . .	25
2.3.1. Sección eficaz para el caso colineal . . . . .	25
2.3.2. Mecanismo de Thomas . . . . .	26

<b>3. Efectos cuánticos en colisiones positrón átomo</b>	<b>31</b>
3.1. Colisiones Multicanales . . . . .	31
3.1.1. Hamiltoniano de tres partículas . . . . .	32
3.1.2. Sección eficaz . . . . .	32
3.2. Método CDW . . . . .	34
3.2.1. Función de onda inicial . . . . .	34
3.2.2. Función de onda del estado final en la aproximación C3 . . . . .	34
3.2.3. Elemento de matriz . . . . .	35
3.2.4. Elemento de matriz reducido . . . . .	37
3.3. Resultados mediante el método CDW . . . . .	37
3.3.1. Resultados para una energía de 100 eV . . . . .	38
3.3.2. Electrones de ensilladura . . . . .	40
<b>4. Mecánica Bohmiana</b>	<b>43</b>
4.1. Introducción . . . . .	43
4.2. Formulación matemática . . . . .	44
4.3. Algunas nociones básicas de la Teoría de Sistemas Dinámicos . . . . .	46
4.3.1. Líneas de corriente . . . . .	46
4.3.2. Vorticidad y Circulación . . . . .	47
4.4. Vórtices tipo cuerpo rígido, e irrotacional . . . . .	48
4.4.1. Vórtices cuánticos . . . . .	49
4.4.2. Vórtices cuánticos en el átomo de hidrógeno . . . . .	49
4.4.3. Vórtices cuánticos y momento angular . . . . .	52
<b>5. Vórtices cuánticos en reacciones positrónicas</b>	<b>53</b>
5.1. Teorema Imagen . . . . .	54
5.2. Vórtices cuánticos en secciones eficaces . . . . .	56
5.3. Vórtices cuánticos y su dependencia con la energía de impacto . . . . .	60
5.3.1. Aparición de pares de vórtices de circulación opuesta . . . . .	61
5.3.2. Evolución de los vórtices cuánticos con la energía de impacto . . . . .	66
5.4. Morfología de los vórtices cuánticos . . . . .	67
5.4.1. Anillo de vorticidad . . . . .	70
<b>Conclusiones</b>	<b>76</b>
<b>A. Unidades Atómicas</b>	<b>78</b>
<b>B. Desde la física de fluidos hacia la mecánica cuántica</b>	<b>80</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>82</b>

Índice de contenidos	iv
Artículos publicados durante la tesis	86
Agradecimientos	87

# Resumen

En el presente trabajo desarrollamos un análisis, tanto clásico como cuántico, de las estructuras presentes en las secciones eficaces de ionización por positrones de átomos y moléculas, modelando el blanco como un átomo hidrogenoide. Se trató la cinemática del problema de tres cuerpos que constituye este sistema de manera adecuada. Esto permite contrastar los resultados teóricos con las técnicas experimentales más avanzadas en la física de positrones.

Como primer acercamiento a este problema desarrollamos un análisis numérico basado en la mecánica clásica. Describimos las principales estructuras presentes en la sección eficaz de ionización, entre ellas algunas conocidas, como el pico de electrones lentos y el de captura al continuo, y otras novedosas como el umbral de orientación. Además, para el caso en que el positrón y el electrón proveniente del blanco escapan en la misma dirección (geometría colineal), se pudo observar la presencia de un máximo en la sección eficaz el cual puede ser atribuido a un proceso de doble colisión binaria denominado mecanismo de Thomas.

Luego realizamos un cálculo cuántico de la sección eficaz para el mismo proceso, a la misma energía de impacto, en la condición de colinealidad. Pudimos identificar las principales estructuras ya mencionadas para el caso clásico, excepto por el mecanismo de Thomas. No obstante, descubrimos que otras estructuras, previamente descritas como mínimos, constituyen en realidad ceros en la sección eficaz. Utilizando la mecánica de Bohm pudimos demostrar que estos ceros representan vórtices cuánticos.

Posteriormente hicimos un análisis exhaustivo de estos vórtices cuánticos para energías de colisión desde decenas hasta miles de electronvoltios. A partir de este procedimiento se pudo determinar la energía a la cual emerge un par de vórtices en la condición de colinealidad, uno de los cuales coincide con el mecanismo de Thomas solo a altas energías. Finalmente, relajamos la condición de colinealidad, pudiendo observar que los vórtices puntuales calculados en la condición de colinealidad, formaban parte de una única estructura de mayor dimensionalidad denominada anillo de vorticidad.

**Palabras clave:** VÓRTICES, POSITRÓN, COLISIÓN, IONIZACIÓN

# Abstract

In this thesis we developed both a classical and a quantum mechanical analysis of the main structures on the ionization cross section of atoms and molecules by positron impact, with the target modeled as a Hydrogen-like atom. We performed a full kinematical description of this three-body problem, which enables a future testing of our theoretical results with cutting-edge experimental techniques.

As a first approach to this problem, we developed a numerical analysis based on classical mechanics. We described the main structures on the ionization cross section, among them, some very well known ones such as the slow electrons and the capture to the continuum cusps, but also a novel structure known as the orientation threshold. Furthermore, for a final state with both the electron and the positron moving in the same direction (collinear geometry), we uncovered a maximum at an electron momentum in agreement with a Thomas mechanism.

The next step of our research involved the quantum mechanical calculation of cross sections for the same process, at the same impact energy, in a collinear geometry. We identified the main structures already present in our classical mechanical calculations, except for the Thomas mechanism. Nevertheless we noted that other structures previously described just as minima, were in fact zeroes on the cross section. By means of the quantum mechanical theory known as Bohmian Mechanics we proved that these zeroes are in fact quantum vortices.

Next we performed a systematic study of the position of these vortices on the momentum space of the electron as a function of impact energies ranging from tenths to thousands of electronvolts. From this analysis we could determine the energy of emergence of paired vortices in a collinear geometry, one of which approaches a position in momenta space in agreement with a Thomas mechanism, but only for high energies. Finally, we relaxed the collinear condition, which allowed us to discover that the point vortices found for a collinear geometry were part of a single structure of higher dimensionality, called vortex ring.

**Keywords:** VORTICES,POSITRON,COLLISION,IONIZATION

# Introducción

*“Hay tanta gente que escribe para lucirse... Yo empecé así y fracasé hasta el día en que olvidé esas pretensiones. ”*

— Adolfo Bioy Casares

## Estado del arte

En años recientes, el estudio y comprensión de reacciones inducidas en átomos y moléculas por impacto de positrones<sup>1</sup> se ha nutrido de una nueva gama de experimentos [1]. La disponibilidad de haces positrónicos monoenergéticos y el incremento de la precisión que se ha logrado en los últimos años en las técnicas de medición están proveyendo de manera cada vez más frecuente nueva evidencia en tópicos tales como la formación de *positronio*, la *aniquilación de pares* y la *dispersión* de positrones.

Además de las mediciones de las secciones eficaces totales y diferenciales [1–3], la implementación futura de *microscopios de reacción* positrónica podría hacer accesible la obtención de una imagen cinemáticamente completa de las partículas involucradas en la colisión [4, 5]. Por lo tanto, predicciones teóricas acerca de estructuras presentes en las secciones eficaces completamente diferenciales (*FDCS*, por su sigla en inglés<sup>2</sup>) comienzan a ser accesibles experimentalmente. Incluso, antes de que el primer microscopio de reacción estuviera operativo, estudios teóricos y experimentales de los espectros de los sistemas de uno y dos cuerpos, ha llevado a esclarecer el entendimiento acerca de algunas de las principales características de la *FDCS* en las colisiones de ionización por impacto de positrones. Éste es el caso, por ejemplo, del efecto de captura electrónica al continuo (ECC por su sigla en inglés<sup>3</sup>) [6], cuyas características en el espectro de momentos tanto del electrón [7] y del ion en retroceso [8] son ahora comprendidos.

## Objeto de estudio y métodos de cálculo

En esta tesis estudiamos las estructuras presentes en procesos atómicos de colisión de positrones con átomos y moléculas. El problema se puede plantear esencialmente

---

<sup>1</sup>El positrón es una partícula de igual masa que el electrón y de carga opuesta.

<sup>2</sup>*Fully Differential Cross Section*.

<sup>3</sup>Electron Capture to the Continuum.



como un *problema de tres cuerpos*, el cual ha sido abordado *clásicamente*<sup>4</sup> de manera extensa en la literatura, y se sabe que no tiene solución exacta. A lo largo de esta tesis se da cuenta de muchas consideraciones acerca del problema clásico de tres cuerpos. No obstante, el análisis de la cinemática del problema sigue siendo válido y útil en el caso cuántico, del cual el caso clásico es un límite.

Se obtuvieron resultados numéricos mediante un método clásico y uno cuántico. Para el primero utilizamos el *Método de Trayectorias Clásicas de Monte-Carlo (CTMC*, por su sigla en inglés<sup>5</sup>)[9, 10], y para el último una teoría cuántica de onda distorsionada, (*CDW*, por su sigla en inglés<sup>6</sup>)[11–13].

Para el caso clásico pudimos observar las estructuras conocidas para una energía de impacto del positrón de 100 eV, así como una novedosa denominada umbral de orientación. Además, encontramos un pico correspondiente al denominado *Mecanismo de Thomas*.

## Mecánica de Bohm y vórtices cuánticos

Para el análisis de los resultados cuánticos utilizamos la formulación de la mecánica cuántica conocida como *Mecánica de Bohm*[14]. Esta teoría postula la existencia de un *campo de velocidades*, lo cual permite a su vez plantear el problema en términos de la *Teoría de Sistemas Dinámicos*. Esto hizo posible discernir, de manera novedosa, la presencia de estructuras conocidas como *vórtices cuánticos* en colisiones positrónicas[15–18]. El campo de velocidades alrededor de los ellos es similar al correspondiente a un *vórtice irrotacional* en la teoría de sistemas dinámicos.

Realizamos una descripción detallada de la localización de los vórtices cuánticos a distintas energías para una configuración en el estado final en la cual electrón y positrón se desplazan en la misma dirección (geometría colineal)[18]. Luego realizamos un estudio de los vórtices cuánticos fuera de la condición de colinealidad, lo cual nos permitió describir la morfología de los vórtices cuánticos[19]. Este análisis permitió comprender la interrelación entre todos los vórtices calculados en un amplio rango de energías, tanto en la condición de colinealidad, como fuera de ella.

## Breve descripción de los capítulos

**Capítulo 1:** Análisis de la cinemática del problema de tres cuerpos. Definición de átomo hidrogenoide. Descripción del método de trayectorias clásicas de Monte-Carlo.

**Capítulo 2:** Exposición de los resultados numéricos obtenidos mediante el método *CTMC* para una colisión positrón- $H_2$  a una energía de impacto del positrón de 100 eV.

---

<sup>4</sup>Es decir, mediante la *Mecánica Clásica*, y como contraposición a un estudio basado en la *Mecánica Cuántica*.

<sup>5</sup>Classical Trajectory Monte-Carlo

<sup>6</sup>Continuum Distorted Wave

Análisis de las estructuras presentes en la sección eficaz tanto en un problema sin restricciones geométricas, como en la geometría colineal. Descripción del fenómeno de *orientación*, y del *Mecanismo de Thomas*.

**Capítulo 3:** Definición de sección eficaz en la teoría de colisiones atómicas. Descripción del método *CDW* utilizado para obtener resultados cuánticos. Exposición de los resultados numéricos obtenidos mediante el método *CDW* para una colisión positrón-*H* a una energía de impacto del positrón de  $100\text{ eV}$ . Análisis de las estructuras presentes en la sección eficaz, descripción de un mínimo muy pronunciado, y su posible relación con el mecanismo de Thomas y un mecanismo de electrones de ensilladura.

**Capítulo 4:** Desarrollo de la formulación bohmiana de la mecánica cuántica, y descripción de vórtices cuánticos.

**Capítulo 5:** Cálculo sistemático del elemento de matriz de ionización mediante el método *CDW* para una colisión positrón-*H* en un amplio rango de energías de impacto del positrón. Descripción de la emergencia de pares de vórtices cuánticos de circulación opuesta, y de las posiciones asintóticas de los vórtices cuánticos al aumentar la energía. Análisis para una energía de impacto del positrón de  $275\text{ eV}$ , fuera de la condición de colinealidad. Descripción de la morfología completa de los vórtices cuánticos, los cuales muestran formar un anillo de vorticidad.

# Capítulo 1

## Tratamiento clásico de colisiones atómicas

En este capítulo desarrollaremos el tratamiento clásico de la ionización de blancos atómicos y moleculares, su cinemática, y el concepto de sección eficaz. Presentaremos además el método de trayectorias clásicas de Monte Carlo (*CTMC*, por su sigla en inglés<sup>1</sup>), el cual se utilizó para obtener los resultados numéricos que discutiremos en el capítulo 2.

### 1.1. Átomo hidrogenoide

Un concepto utilizado en toda esta tesis en la descripción del proceso de colisión, tanto en el tratamiento clásico como cuántico, es el de *átomo hidrogenoide*.

Trataremos al blanco como un *átomo hidrogenoide*, que es aquél que posee una estructura similar a la del hidrógeno atómico ( $H$ ), que consta de un núcleo de carga positiva constituido por un protón, y un electrón de carga opuesta.

También se pueden modelar como átomos hidrogenoides blancos con más de un electrón (e inclusive con la carga del núcleo repartida en más de un centro), si la energía de colisión es suficientemente alta como para considerar que el proyectil interactúa con sólo uno de los electrones del blanco. Estos electrones, cuya participación en el proceso de colisión es preponderante, son denominados *electrones activos*.

En la mecánica cuántica, los niveles de energía negativa (conocidos como *estados ligados*) se encuentran discretizados, y existe un estado de energía mínima que el sistema puede alcanzar, denominado *estado fundamental*. Un concepto relacionado con este último es la *energía de ionización*  $\epsilon_i$ . La primera energía de ionización es la mínima necesaria para extraer un electrón del mismo.

En el caso del átomo de hidrógeno:  $\epsilon_i = (Z^2/2) au$ , donde  $Z$  es la carga del protón,

---

<sup>1</sup> *Classical Trajectory Monte Carlo*.

y *au* hace referencia al sistema de *unidades atómicas* (ver apéndice A), en las cuales la *constante reducida de Planck*  $\hbar$ , la *constante de Coulomb*  $k_e$ , la masa del electrón y la carga del electrón, son consideradas unitarias. Este sistema de unidades es utilizado comúnmente en cálculos teóricos de la física de *Colisiones Atómicas* y en la *Física Atómica, Molecular y Óptica*, debido a que simplifica la notación. Utilizaremos unidades atómicas en el resto de la tesis, salvo en algunos casos en los cuales se lo indica explícitamente.

La energía de ionización de blancos con más protones que el  $H$ , no tiene una dependencia sencilla con la carga como la de este último. No obstante, se puede modelar el blanco como una partícula con un núcleo compuesto por una *carga efectiva*  $|Z^*| = \sqrt{2\epsilon_i}$  (donde el valor de  $\epsilon_i$  puede incluso provenir de un dato experimental). De esta manera, se puede considerar la colisión como un *problema de tres cuerpos* con un blanco con energía interna  $-\epsilon_i$ , ya que esa es la energía que el proyectil debe vencer para extraer al electrón del blanco hidrogenoide. En este caso, la *sección eficaz*, la cual definiremos en la sección 1.7, debe multiplicarse por el número de *electrones activos*, que pueden participar del proceso.

## 1.2. Descripción del proceso de colisión

Analizaremos la *ionización simple*<sup>2</sup> de un blanco hidrogenoide, compuesto por un núcleo ( $T$ ) de masa  $M_T$ , y un electrón ( $e$ ) de masa  $m$ , por impacto de un proyectil ( $P$ ) de masa  $M_P$ , que se aproxima desde el infinito a velocidad uniforme  $\mathbf{v}$ , con cierto apartamiento  $\boldsymbol{\rho}$  (denominado *parámetro de impacto*) respecto de la colisión frontal, como se observa en la figura 1.1.

Las partículas interactúan entre sí mediante el potencial *coulombiano*. Dadas dos partículas  $a$  y  $b$  de cargas  $Z_a$  y  $Z_b$ , cuyas posiciones en el espacio son  $\mathbf{r}_a$  y  $\mathbf{r}_b$ , el potencial de interacción coulombiana entre ambas  $V_{ab}$  está dado por:

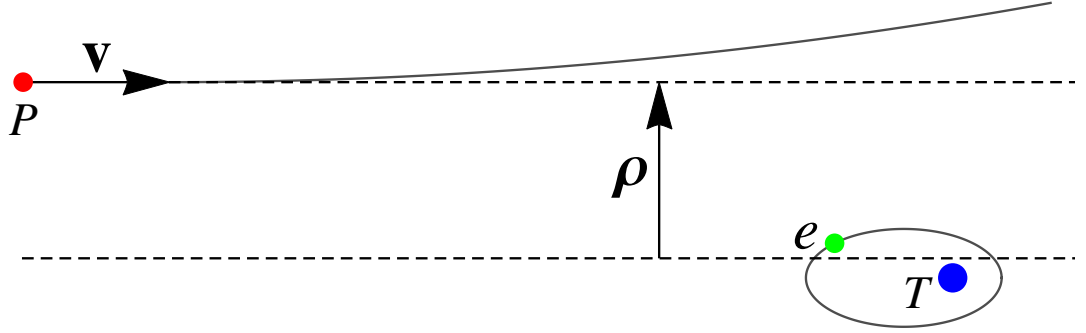
$$V_{ab} = \frac{Z_a Z_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} ,$$

## 1.3. Método de trayectorias clásicas de Monte Carlo

El método de trayectorias clásicas de Monte Carlo, consiste en calcular las trayectorias de las tres partículas involucradas en la colisión para distintas condiciones iniciales,

---

<sup>2</sup>La ionización simple es aquella en la cual sólo participa uno de los electrones del blanco.



**Figura 1.1:** Diagrama de la colisión. El proyectil  $P$  impacta con una velocidad  $\mathbf{v}$  sobre un blanco compuesto por un núcleo  $T$  y un electrón  $e$ . Se representa el parámetro de impacto  $\rho$ , el cual está determinado por la mínima distancia entre la recta establecida por la dirección inicial del proyectil y el centro de masas del blanco.

y computar y clasificar las distribuciones de momentos finales.

El procedimiento de cálculo que utilizamos es similar al que puede hallarse en el trabajo pionero de Abrines y Percival [20], como también en otros trabajos en los que se describe de manera clara y completa sus fundamentos e implementación, como los de Lewartowski y Courbin [21], Bandarage y Parson [22], y Fiol *et al* [23]. Adoptamos el algoritmo de este último para obtener los resultados numéricos que se describen más adelante.

El algoritmo de cálculo del método *CTMC* consta de tres etapas:

- **Generación de las condiciones iniciales**

Se especifica el estado del blanco y de la partícula incidente a tiempo  $t \rightarrow -\infty$  (definiendo  $t = 0$  como el momento de la colisión).

- **Integración numérica de las ecuaciones de movimiento**

Se hace evolucionar las partículas a partir de las condiciones iniciales mediante las interacciones coulombianas mutuas.

- **Clasificación de los procesos resultantes al concluir la colisión**

Una vez que los momentos de las partículas o las magnitudes derivadas de ellos convergen a valores estacionarios, se da por finalizado el cálculo y se identifican los distintos tipos de resultados de la colisión, denominados *canales de colisión*.

## 1.4. Condiciones iniciales

Para determinar las condiciones iniciales, se debe especificar el estado dinámico del blanco y el parámetro de impacto  $\rho$  del positrón respecto del blanco a tiempo  $t \rightarrow -\infty$ .

### 1.4.1. Preparación del blanco

En la descripción clásica del átomo hidrogenoide, el electrón orbita en una trayectoria elíptica. Debido a la conservación del momento angular, esta elipse se halla siempre sobre el mismo plano, denominado *plano orbital*. La forma de la elipse está determinada por la *ecuación de Kepler*. Esta ecuación proviene de la *Mecánica Celeste* [24], y fue utilizada primeramente para describir el movimiento planetario, como puede ser el movimiento de la Tierra alrededor del Sol, o de la Luna alrededor de la Tierra. Su expresión, cuyos parámetros se ven representados en la figura 1.2, es la siguiente:

$$\alpha = \beta - \chi \sin \beta , \quad (1.1)$$

donde  $\beta$  es la *anomalía excéntrica*,  $\chi$  es la *excentricidad* de la elipse que describe el electrón alrededor del núcleo<sup>3</sup>, las cuales se grafican en la figura 1.2, y  $\alpha$  es la *anomalía media*, la cual representa la fracción del período orbital transcurrido, expresada como ángulo. Geométricamente se puede interpretar a  $\alpha$  como el ángulo que forma con el eje de la elipse un cuerpo ficticio que se mueve uniformemente sobre una circunferencia cuyo diámetro coincide con el eje principal de la elipse, llamada *circunferencia principal*, con el mismo período que el electrón. Los parámetros en la ecuación 1.1 se eligen a partir de un *ensamble microcanónico* (es decir, de un conjunto de estados que conservan la energía total), con energía  $-\epsilon_i$ , de manera aleatoria. Esto se logra seleccionando los valores de  $\chi$  y  $\alpha$  ( $\beta$  queda determinado a partir de la ecuación 1.1) de una distribución uniforme en el rango:

$$0 \leq \chi^2 \leq 1 \quad 0 \leq \alpha \leq 1 .$$

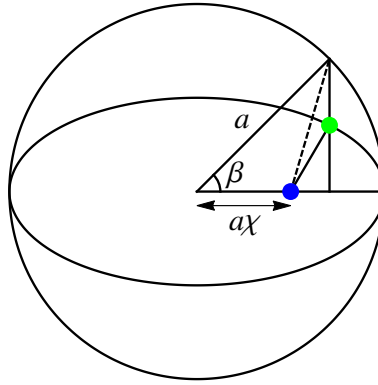
La distribución uniforme en  $\chi^2$  asegura que el núcleo quede distribuido de igual manera dentro de la circunferencia principal, de área  $\pi a^2$ . Al elegir una distribución uniforme en  $\alpha$ , se asegura que el electrón se encuentre con igual probabilidad a lo largo de un período de revolución, más allá de la excentricidad de la elipse.

### Ángulos de Euler

La ecuación 1.1 no define una única órbita, sino que, debido a la isotropía del espacio, se pueden definir infinitas órbitas rotando el plano orbital. Una forma de

---

<sup>3</sup>La excentricidad de un círculo es nula, por lo tanto se puede pensar como cuánto se aproxima la órbita a esta figura geométrica.



**Figura 1.2:** Plano de la órbita elíptica en que se mueve el electrón (verde) alrededor del núcleo (azul). La órbita elíptica se grafica inscrita en una circunferencia de diámetro igual al eje mayor de la elipse, de longitud  $2a$  denominada *circunferencia principal*. El núcleo se halla en uno de los focos de la elipse, a una distancia  $a\chi$  del centro de la elipse, donde  $\chi$  la excentricidad.  $\beta$  es la anomalía excéntrica, la cual es el ángulo medido desde el centro de la elipse, que forma la proyección del electrón sobre la circunferencia principal, y el eje mayor de la elipse.

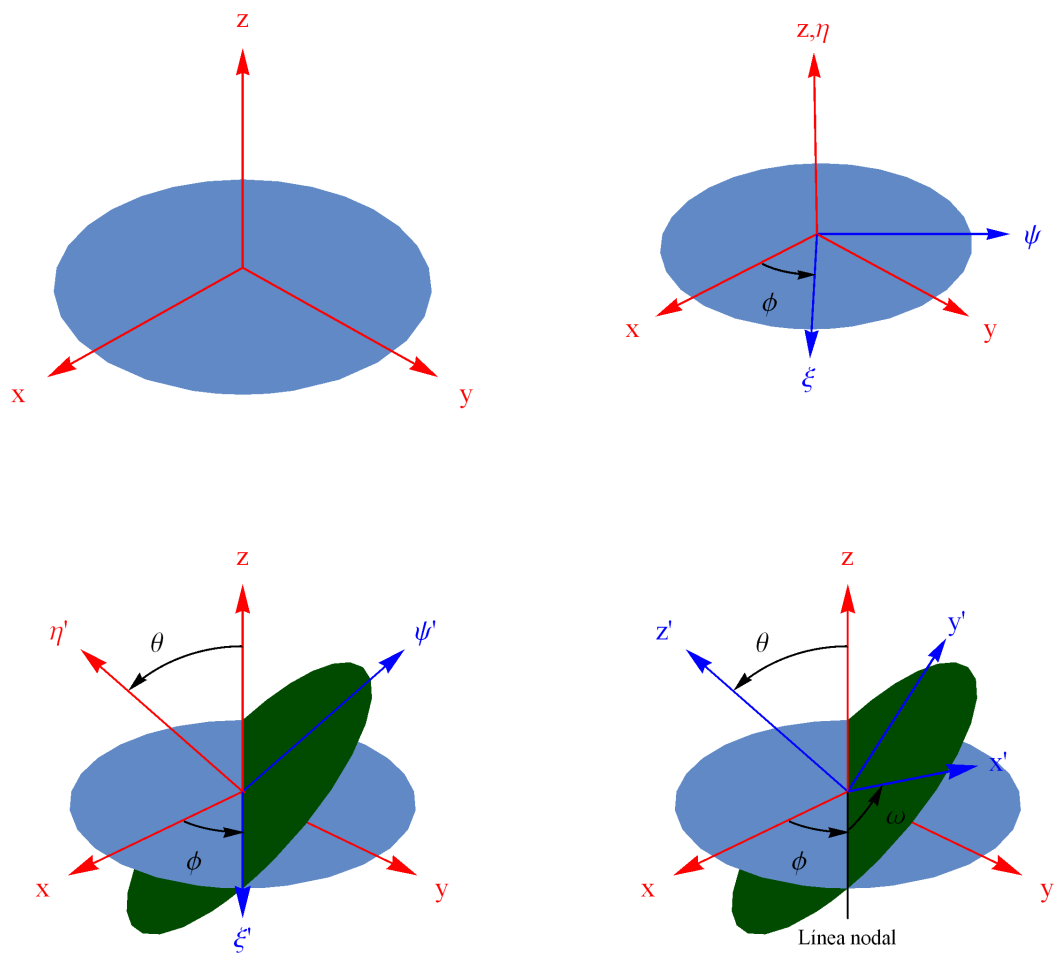
hacerlo es mediante tres ángulos sucesivos de rotación  $(\phi, \omega, \nu)$  en una secuencia que detallaremos a continuación, denominados *ángulos de Euler*.

Para comprender cómo se rota el plano orbital por medio de esta transformación, veamos cómo opera sobre un conjunto de ejes de coordenadas ortogonales entre sí. Sea un conjunto de ejes cartesianos  $(x, y, z)$ , como se observa en la figura 1.3. Comenzamos rotando al sistema alrededor del eje  $z$  en un ángulo  $\phi$  en sentido antihorario, quedando así definido un nuevo conjunto de ejes  $(\xi, \psi, \eta)$ . Si ahora rotamos estos ejes en un ángulo  $\omega$  alrededor del eje  $\xi$  en sentido antihorario, produciremos un nuevo conjunto de coordenadas  $(\xi, \psi', \eta')$ . El eje  $\xi'$  se encuentra en la intersección de los planos  $xy$ , y  $\xi'\eta'$ , y es conocido como *línea nodal*. Finalmente, los ejes  $(\xi, \psi', \eta')$  se rotan un ángulo  $\nu$  en sentido antihorario, alrededor del eje  $\eta'$ , para terminar obteniendo el sistema de ejes  $(x', y', z')$  deseado, resultado de la transformación total mediante ángulos de Euler. La isotropía del espacio implica que  $\cos \nu$ ,  $\phi$  y  $\omega$  estén uniformemente distribuidos en el rango:

$$0 \leq \phi, \omega \leq 2\pi \quad -1 \leq \cos \nu \leq 1$$

### 1.4.2. Preparación del proyectil

Con el fin de generar el flujo de proyectiles, los valores del parámetro de impacto  $\rho$  se eligen aleatoriamente a partir de una distribución uniforme en  $\rho^2$ , con  $\rho$  menor a un



**Figura 1.3:** Rotaciones que definen los ángulos de Euler.



valor máximo  $\rho_{max}$ , más allá del cual la interacción de interés se considera despreciable<sup>4</sup>:

$$0 \leq \rho^2 \leq \rho_{max}^2 . \quad (1.2)$$

El valor de  $\rho_{max}$  se debe determinar numéricamente para cada energía, realizando la integración de las ecuaciones de movimiento para parámetros de impacto fijos, incrementando su valor hasta un valor en que se considere que la cantidad de partículas dispersadas por el blanco es despreciable.

## 1.5. Resolución de las ecuaciones de movimiento

Se puede describir de manera completa el movimiento de un sistema de  $N$  partículas en el espacio cartesiano tridimensional mediante la integración de las *ecuaciones de movimiento de Hamilton*, las cuales componen un sistema de  $6N$  ecuaciones diferenciales de primer orden. Para el problema de tres cuerpos ( $N = 3$ ), estas ecuaciones se resuelven de manera sencilla en un sistema de coordenadas denominado *Coordenadas de Jacobi*, que desarrollaremos brevemente antes de resolver la dinámica del problema.

### 1.5.1. Coordenadas de Jacobi

El centro de masas para el conjunto de tres partículas bajo estudio sigue un movimiento a velocidad uniforme:

$$\mathbf{v}_{cm} = M_P \mathbf{v} / M , \quad (1.3)$$

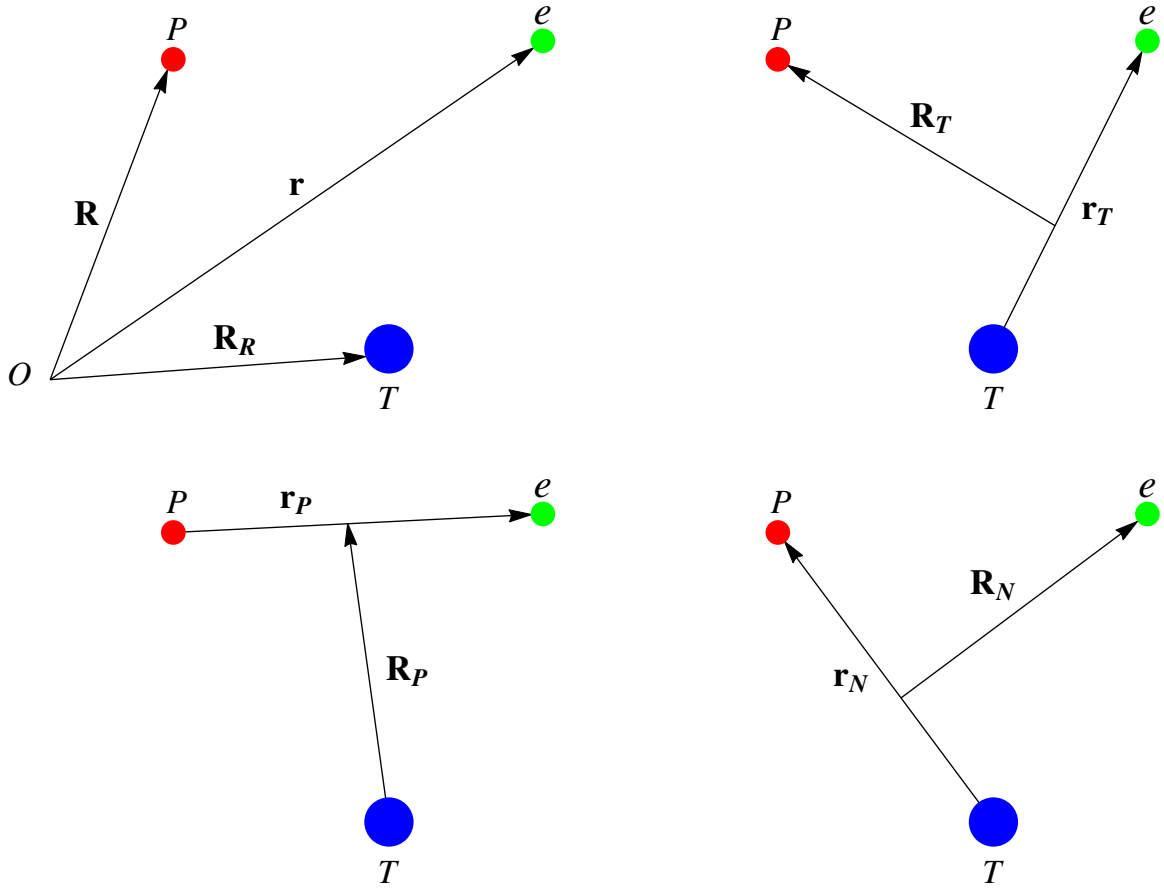
donde  $M = m + M_P + M_T$  es la masa total del sistema. Por lo tanto, es conveniente describir su movimiento en un sistema de coordenadas que permita separar el de su centro de masas. Una posible elección, que es la que realizamos en esta tesis, es utilizar cualquiera de los tres pares posibles de coordenadas de Jacobi [25]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_T \\ \mathbf{R}_T \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{r}_P \\ \mathbf{R}_P \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{r}_N \\ \mathbf{R}_N \end{pmatrix},$$

el cual se muestra en la figura 1.4. Sean  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{R}_R$ , las coordenadas en el sistema de laboratorio del electrón, el proyectil y el blanco, respectivamente, las coordenadas de

---

<sup>4</sup>Esto es así debido a que para generar una distribución uniforme de puntos en un disco de área  $\pi\rho_{max}^2$ , los mismos deben ser elegidos con un peso proporcional a  $\rho^2$ .



**Figura 1.4:** Arriba a la izquierda vemos las posiciones de las partículas en el sistema de coordenadas del laboratorio. Las tres figuras restantes corresponden a los pares de coordenadas de Jacobi  $T$  (arriba a la derecha),  $P$  (abajo a la izquierda) y  $N$  (abajo a la derecha).

Jacobi se pueden expresar en función de estas últimas, como:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_P &= \mathbf{r} - \mathbf{R}, & \mathbf{R}_P &= \frac{M_P \mathbf{R} + m \mathbf{r}}{M_P + m} - \mathbf{R}_R \\
 \mathbf{r}_T &= \mathbf{r} - \mathbf{R}_R, & \mathbf{R}_T &= \mathbf{R} - \frac{M_T \mathbf{R}_R + m \mathbf{r}}{M_T + m} \\
 \mathbf{r}_N &= \mathbf{R} - \mathbf{R}_R, & \mathbf{R}_N &= \mathbf{r} - \frac{M_T \mathbf{R}_R + M_P \mathbf{R}}{M_T + M_P}.
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

Se definen los *momentos de Jacobi*, del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_j &= m_j \dot{\mathbf{r}}_j \\
 \mathbf{K}_j &= \mu_j \dot{\mathbf{R}}_j \quad (j = T, P, \text{ o } N),
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

y las *masas reducidas*  $m_j$  y  $\mu_j$ , como:

$$\begin{aligned} m_N &= \frac{M_P M_T}{M_P + M_T} & \mu_N &= \frac{(M_P + M_T)m}{M} \\ m_T &= \frac{m M_T}{m + M_T} & \mu_T &= \frac{(m + M_T)M_P}{M} \\ m_P &= \frac{m M_P}{m + M_P} & \mu_P &= \frac{(m + M_P)M_T}{M} . \end{aligned} \quad (1.6)$$

### 1.5.2. Dinámica en coordenadas de Jacobi

Para resolver la dinámica del problema existen distintos formalismos, los cuales constituyen una generalización de las *leyes de Newton*[26]. El método numérico que utilizamos se basa en la denominada *mecánica hamiltoniana*. La misma utiliza como punto de partida la *función hamiltoniana*, o simplemente *hamiltoniano*. En el problema que estamos analizando, para el cual los potenciales dependen solamente de las distancias entre las partículas, y las mismas no tienen ningún tipo de restricción geométrica, el hamiltoniano  $H$  es igual a la energía mecánica total, la cual a su vez es la suma de la energía cinética  $H_0$  y la potencial  $V$ :

$$H = H_0 + V .$$

En el sistema de laboratorio, la energía cinética, también denominada *hamiltoniano libre*, para nuestro problema de tres partículas, se expresa como:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{m\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + \frac{M_P\dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{M_T\dot{\mathbf{R}}_R^2}{2} \\ &= \frac{k^2}{2m} + \frac{K^2}{2M_P} + \frac{K_R^2}{2M_T} . \end{aligned} \quad (1.7)$$

Utilizando el sistema de coordenadas de Jacobi, podemos expresar el hamiltoniano 1.7 de la siguiente manera:

$$H_0 = \frac{Mv_{cm}^2}{2} + \frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j} , \quad (1.8)$$

donde el primer término en 1.7 corresponde a la energía del centro de masas.

De este modo, el hamiltoniano total en el sistema centro de masas  $H_{cm}$  se expresa, en coordenadas de Jacobi, de la siguiente manera:

$$H_{cm} = \frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j} + V_N + V_P + V_T , \quad (1.9)$$

donde hemos definido los potenciales:

$$V_N = \frac{Z_P Z_T}{r_N} \quad V_P = -\frac{Z_P}{r_P} \quad V_T = -\frac{Z_T}{r_T} . \quad (1.10)$$

Finalmente, las ecuaciones de movimiento del sistema se encuentran resolviendo el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales de primer orden:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}_j &= \frac{\partial H_{cm}}{\partial \mathbf{k}_j} = \frac{\mathbf{k}_j}{m_j} \\ \dot{\mathbf{R}}_j &= \frac{\partial H_{cm}}{\partial \mathbf{K}_j} = \frac{\mathbf{K}_j}{\mu_j} \\ \dot{\mathbf{k}}_j &= -\frac{\partial H_{cm}}{\partial \mathbf{r}_j} = \sum_{i=P,T,N} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \mathbf{r}_j} \right)_{\mathbf{R}_j} \nabla_{\mathbf{r}_i} V_i = \sum_{i=P,T,N} \mathcal{M}_{ij}^{11} \nabla_{\mathbf{r}_i} V_i \\ \dot{\mathbf{K}}_j &= -\frac{\partial H_{cm}}{\partial \mathbf{R}_j} = \sum_{i=P,T,N} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \mathbf{R}_j} \right)_{\mathbf{r}_j} \nabla_{\mathbf{r}_i} V_i = \sum_{i=P,T,N} \mathcal{M}_{ij}^{12} \nabla_{\mathbf{r}_i} V_i , \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{M}_{ij}$  son las *matrices de masas*, las cuales son matrices de transformación de coordenadas y momentos de Jacobi entre sí, definidas por:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_i \\ \mathbf{R}_i \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{ij} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_j \\ \mathbf{R}_j \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{k}_i \\ \mathbf{K}_i \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{ji}^\dagger \begin{pmatrix} \mathbf{k}_j \\ \mathbf{K}_j \end{pmatrix} ,$$

y los superíndices corresponden a los elementos de matriz de las mismas. El símbolo  $\dagger$  indica la transpuesta conjugada de la matriz. Las demás cantidades ya fueron descritas en las secciones anteriores. Las matrices de masas tienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{PT} &= \begin{pmatrix} m_T/m & -1 \\ m_P/\mu_T & m_P/m \end{pmatrix} & \mathcal{M}_{NT} &= \begin{pmatrix} m_T/M_T & 1 \\ m_N/\mu_T & -m_N/M_T \end{pmatrix} \\ \mathcal{M}_{NP} &= \begin{pmatrix} -m_P/M_P & 1 \\ m_N/\mu_P & m_N/M_P \end{pmatrix} & \mathcal{M}_{TP} &= \begin{pmatrix} m_P/m & 1 \\ -m_T/\mu_P & m_T/m \end{pmatrix} \\ \mathcal{M}_{TN} &= \begin{pmatrix} m_N/M_T & 1 \\ m_T/\mu_N & -m_T/M_T \end{pmatrix} & \mathcal{M}_{PN} &= \begin{pmatrix} -m_N/M_P & 1 \\ m_P/\mu_N & m_P/M_P \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Una elección posible para resolver estas ecuaciones es tomar el par con  $j = T$ , que es la que se utiliza en nuestro cálculo, y que describe la evolución temporal del sistema a partir del movimiento relativo del electrón respecto del núcleo atómico ( $\mathbf{r}_T$ ), y el movimiento del proyectil respecto del centro de masas electrón-núcleo ( $\mathbf{R}_T$ ), como se ve en la figura 1.4. Esto describe de manera adecuada las condiciones iniciales, para las cuales el proyectil se encuentra alejado del sistema electrón-núcleo. La integración se realiza mediante un algoritmo de punto medio modificado con paso de control adaptable

tipo Bulirsch-Stoer ([27] [23] [28]).

## 1.6. Clasificación del estado final

El estado final en que se encuentra el conjunto de partículas *proyectil*  $P$ , *electrón*  $e$  y *núcleo*  $T$  en una reacción  $P + (eT)$  se denomina *canal* de colisión, y puede ser uno de los siguientes:

$$P + (eT) \longrightarrow \begin{cases} P + (eT) & \text{Dispersión elástica} \\ P + (eT)_{exc} & \text{Excitación} \\ (Pe) + T & \text{Intercambio de carga} \\ P + e + T & \text{Ionización} \end{cases}$$

A continuación describimos brevemente cada uno de ellos:

- **Dispersión elástica** La energía interna inicial del blanco  $(eT)$  ( $\epsilon_0^{inic}$ ) es igual a la final ( $\epsilon_0^{final}$ ), es decir:

$$\epsilon_0^{inic} = \epsilon_0^{final} < 0$$

- **Excitación** El proyectil pierde energía a expensas del electrón, que pasa a un estado de mayor energía ( $\epsilon_{exc}^{final}$ ):

$$\epsilon_0^{inic} < \epsilon_{exc}^{final} < 0$$

- **Intercambio de carga** El proyectil arranca el electrón al blanco, y pasan a formar el estado ligado  $(eP)$ .
- **Ionización** La contribución de cada uno de los términos de interacción coulombiana (ecuación 1.9), tiende a cero. Debido a esto, el movimiento de las partículas está regido por el hamiltoniano libre, y las partículas se desplazarán asintóticamente con movimiento uniforme.

Nosotros concentraremos nuestro estudio a lo largo de esta tesis en este último canal de *ionización*. Debido a esto, la integración de las ecuaciones de movimiento concluye cuando la suma de la energía cinética dada por el momento relativo entre cada par de partículas y la energía potencial entre ambas es mayor a cero. Es decir, se debe cumplir:

$$\frac{k_j^2}{2} + V_j > 0 \quad (j = T, e, P, N) ,$$

También es posible establecer otros criterios numéricos para la finalización del cálculo en el estudio de la ionización como, por ejemplo, en el trabajo de Barrachina y Courbin [29] donde éste se basa en la separación internuclear.

## 1.7. Sección eficaz en colisiones de ionización

En nuestro experimento de colisión clásico, sea  $n$  el número calculado de trayectorias, y  $\delta n_i$  el número de eventos para los cuales se cumple el criterio que da lugar a la ionización, y las partículas terminan con momento  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{K}_R$  en un rango  $\delta\mathbf{k}\delta\mathbf{K}\delta\mathbf{K}_R$ , podemos expresar una magnitud denominada *sección eficaz diferencial completa (FDCS)*, de la siguiente manera[23]:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}d\mathbf{K}d\mathbf{K}_R} = \frac{\pi\rho_{max}^2}{n} \sum_{\rho \leq \rho_{max}} \frac{\delta n_i(\rho)}{\delta\mathbf{k}\delta\mathbf{K}\delta\mathbf{K}_R}, \quad (1.11)$$

donde  $\rho_{max}$  es el máximo parámetro de impacto de nuestro cálculo.

La *FDCS* se puede escribir en términos de los impulsos de Jacobi como:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}d\mathbf{K}d\mathbf{K}_R} = \delta(\mathbf{v}_{cm} - \mathbf{k} - \mathbf{K} - \mathbf{K}_R) \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_j d\mathbf{K}_j}.$$

En particular, debido a que  $\mathbf{K}_N = \mathbf{k} - \mathbf{v}_{cm}$ , la sección eficaz doble diferencial en el momento del electrón es:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{d\sigma}{d\mathbf{K}_N} = \int \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_N d\mathbf{K}_N} d\mathbf{k}_N.$$

A partir de la ecuación 1.11, esta cantidad se calcula como [23]:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{\pi\rho_{max}^2}{n} \sum_{\rho \leq \rho_{max}} \frac{\delta n_i(\rho)}{\delta\mathbf{k}}. \quad (1.12)$$

También es posible expresar la sección eficaz diferencial en función del módulo del momento  $k$  y el ángulo sólido del momento del electrón  $\Omega$ , teniendo en cuenta que  $d\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$ , como:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{d\sigma}{k^2 dk d\Omega}.$$

Además, considerando que la energía del electrón es  $E = k^2/2$ , podemos escribir:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{d\sigma}{\sqrt{2E} dE d\Omega}.$$

A su vez, debido a la simetría axial alrededor de la dirección de la velocidad inicial, la sección eficaz puede expresarse solamente en términos del momento  $k$  o la energía  $E$ ,

y el ángulo acimutal  $\theta$  del momento del electrón respecto de este eje, definido como:  $\cos \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}/(kv)$ , de la siguiente forma:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{d\sigma}{2\pi k^2 \sin \theta dk d\theta}$$

o:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{d\sigma}{2\pi \sqrt{2E} \sin \theta dE d\theta} .$$

De esta manera, el método para calcular la sección eficaz de ionización se puede calcular mediante el método *CTMC* como:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{\pi \rho_{max}^2}{2\pi n k^2 \sin \theta} \sum_{\rho \leq \rho_{max}} \frac{\delta n_i(\rho)}{\delta k \delta \theta} ,$$

o:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} = \frac{\pi \rho_{max}^2}{2\pi n \sqrt{2E} \sin \theta} \sum_{\rho \leq \rho_{max}} \frac{\delta n_i(\rho)}{\delta E \delta \theta} .$$

También puede resultar útil analizar la sección eficaz en una variable, sin tener el comportamiento respecto de una de las otras, integrando en la misma. Se puede por ejemplo integrar en el momento, y obtener:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} k^2 dk ,$$

o en el ángulo:

$$\frac{d\sigma}{k^2 dk} = \int \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}} d\Omega .$$

## 1.8. Reducción de la dimensionalidad

El problema de la ionización de un átomo hidrogenoide por impacto de un positrón, requiere en principio de 9 variables para ser descrito completamente. Debido a la conservación de energía-momento, este número se reduce a 5. Además, en ausencia de blancos o proyectiles polarizados<sup>5</sup>, como en el caso de estudio<sup>6</sup>, la colisión es axisimétrica alrededor de la velocidad inicial  $\mathbf{v}$ ; y la dimensionalidad del problema se reduce a 4. Pero incluso la simple representación de tal objeto multidimensional resultaría una tarea colosal en dos aspectos básicos. Por un lado, está el problema de elegir un conjunto de 4 variables que representen adecuadamente el problema estudiado. Naturalmente, hay una gran libertad en la elección de estas cantidades. Estas elecciones suelen relacionarse

<sup>5</sup>Se dice que un átomo está polarizado cuando la densidad electrónica del mismo no es esféricamente simétrica. Además, cuando se trata con partículas idénticas, es importante el *spin* de las partículas, el cual determina también una polarización

<sup>6</sup>Esto es así debido a que tenemos tres partículas distintas, y consideraremos que el átomo hidrogenoide se encuentra en su *estado fundamental*

a experimentos específicos. Este es el caso de la así llamada *Geometría de Rochester* [30] donde *FDCS* es escrita en términos de los ángulos polares de dos partículas salientes, su ángulo relativo acimutal y la energía de una de ellas. Esta elección es completa en el sentido que cualquier otro conjunto de variables independientes puede ser relacionado con éste.

La segunda dificultad con la descripción de la *FDCS* es que no puede ser representada en un espacio tridimensional. La búsqueda de una solución práctica a este impedimento es tan vieja como la ciencia y el arte mismos ([31], [32]). Una manera de hacer esta representación asequible, pero no la única, es reducir la dimensionalidad de la sección eficaz, y hay dos maneras diferentes de realizar esta tarea. Una opción es integrar la sección eficaz en algunas de sus variables, tal como se mostró en la sección anterior, y al igual que en cualquier técnica espectroscópica, donde sólo se investigan la energía y/o el ángulo de emisión de una de las partículas en el estado final. La segunda opción, es fijar una o más variables a una condición particular. Una elección muy común, y a su vez conveniente al analizar procesos con dos partículas muy similares en el estado final, como en colisiones ( $e, 2e$ ) y ( $p, 2p$ ) (ver por ejemplo [33]), es la así llamada *geometría simétrica*. Ésta fue introducida por Gottschalk *et al* en 1965 para el estudio del *bremsstrahlung*<sup>7</sup> protón-protón [34]. En esta geometría, las dos partículas idénticas se estudian en la condición en la cual las iguales energías y ángulos polares de ambas son iguales. Esta geometría es claramente equivalente a intersectar la *FDCS* con una superficie  $2D$ , de manera tal de hacerla dependiente solamente de dos parámetros.

Otra geometría estándar que cumple con la misma reducción es la *geometría colineal*, donde el electrón y el positrón son forzados a moverse en la misma dirección, es decir  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{K} = \pm kK$ . En contraposición a la geometría simétrica de Gottschalk, aquí  $\mathbf{k}$  es paralelo (o antiparalelo) a  $\mathbf{K}$ . Hay que tener en cuenta que la variación de  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{K}$  no es independiente, ya que deben compartir su energía de acuerdo a:

$$k^2 + K^2 \approx v^2 - 2\epsilon_i .$$

En este trabajo, cuando realicemos reducción de la dimensionalidad, emplearemos preferentemente esta última geometría, cuya justificación se comprenderá a medida que mostremos y analicemos nuestros resultados.

---

<sup>7</sup>Radiación emitida por una partícula cargada debido a su aceleración.



## Capítulo 2

# Resultados mediante el método CTMC

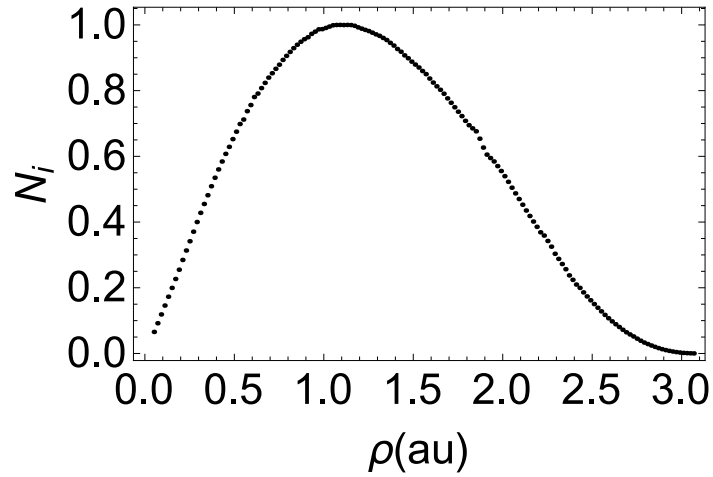
En este capítulo mostraremos resultados obtenidos mediante el método *CTMC* presentado en el capítulo 1, y analizaremos las estructuras que aparecen en las secciones eficaces de ionización de hidrógeno molecular ( $H_2$ ) por impacto de positrones. Realizaremos una descripción de las mismas en base a consideraciones cinemáticas y dinámicas básicas. Mostraremos resultados tanto para un problema en el que no se imponen restricciones a los momentos finales de las partículas, y también para el caso en que empleamos una geometría colineal, para la cual positrón y electrón escapan en la misma dirección. Este estudio es importante ya que en el capítulo 3 realizaremos cálculos cuánticos para una colisión similar, y veremos si las estructuras halladas en este capítulo, persisten.

### 2.1. Resultados numéricos para el problema sin restricciones

En esta sección vamos a presentar los resultados del cálculo de la sección eficaz de una colisión positrón- $H_2$  obtenidos mediante el método *CTMC*, para energía de impacto del positrón de  $100\text{ eV}$ <sup>1</sup>. Para realizar estos cálculos, tratamos el problema tal como desarrollamos en la sección 1.1, modelando al  $H_2$  como un átomo hidrogenoide con dos electrones activos, y teniendo en cuenta que su primera energía de ionización es  $\epsilon_i = 15.6\text{ eV}$ . Debemos mencionar que no impusimos restricciones geométricas ni dinámicas a las partículas.

---

<sup>1</sup>Indicaremos la energía de impacto del positrón en este sistema de unidades, que es en el cual se suelen expresar los resultados experimentales. La equivalencia entre este sistema y el de unidades atómicas, ver apéndice A.



**Figura 2.1:** Número de eventos de ionización  $N_i$  en función del parámetro de impacto, para  $10^3$  trayectorias calculadas a una energía de impacto del positrón de  $100 \text{ eV}$ . La distribución está normalizada por el máximo de la misma.

### 2.1.1. Determinación numérica del máximo parámetro de impacto

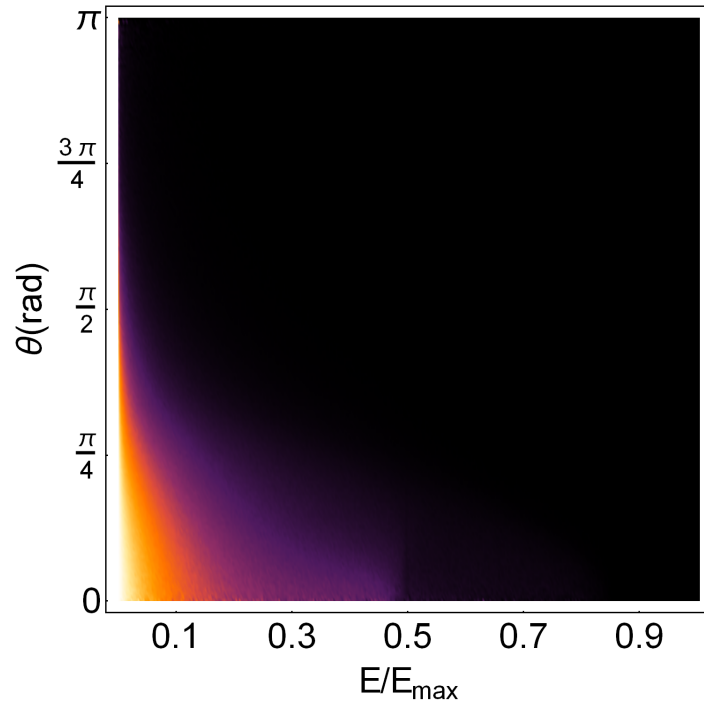
Para realizar el cálculo numérico de las trayectorias clásicas se debe imponer un parámetro de impacto máximo  $\rho_{max}$  más allá del cual no se generan condiciones iniciales<sup>2</sup>. El mismo sólo se puede determinar de manera numérica, y para ello se lanza primeramente un número pequeño de trayectorias, y se realiza un histograma con el número de eventos de ionización por cada parámetro de impacto.

En la figura 2.1 se observa la distribución de parámetros de impacto  $N_i$  que da origen a la ionización del blanco para  $10^3$  trayectorias, normalizada por el máximo de la distribución, para una energía de  $100 \text{ eV}$ . Allí se puede notar que el número de partículas ionizadas al acercarse a  $\rho_{max} = 3.1$  decrece notoriamente, por lo cual no se calcularon trayectorias con parámetros de impacto más allá de este valor. La forma funcional de esta curva está de acuerdo además con resultados obtenidos previamente[22].

## 2.2. Sección eficaz para el problema sin restricciones

En esta sección mostraremos los resultados de la sección eficaz diferencial  $d\sigma/d\mathbf{k}$  de ionización de  $H_2$  por impacto de positrones de  $100 \text{ eV}$  [8, 9, 35, 36], obtenida mediante el calculo de  $N > 10^8$  trayectorias. Se tuvieron en cuenta todos los casos que dan lugar a ionización sin establecer restricciones geométricas ni dinámicas. Con esto nos referimos

<sup>2</sup>Ya que al aumentar demasiado el parámetro de impacto los proyectiles no interactúan con el blanco y por ende no se produce ionización.



**Figura 2.2:** Gráfico de la sección eficaz  $d\sigma/dk$  de ionización de moléculas de  $H_2$  por impacto de positrones a 100 eV. El eje de la energía está normalizado por la máxima energía, denominada  $E_{max}$ , que puede adquirir el electrón.

a que al contar cuántos electrones finalizan con determinada energía y ángulo, no se impone ninguna condición a la dirección o cantidad de movimiento de las demás.

### 2.2.1. Límite cinemático del espacio de momentos

En la figura 2.2 se puede ver una gráfica de densidades de la sección eficaz diferencial  $d\sigma/dk$ . El eje de energía está normalizado por la energía máxima  $E_{max}$  que puede alcanzar el electrón debido a la conservación de energía y momento, la cual calculamos analíticamente más abajo. Se puede notar que la cantidad de eventos de ionización cae a fuertemente al aproximarse a  $E/E_{max} = 1.0$ , no habiéndose registrado eventos para una energía mayor.

La energía inicial de la colisión es la suma de la energía cinética del positrón y la energía interna inicial del blanco  $\epsilon_0^{inic}$ . Para el átomo hidrogenoide, consideramos  $\epsilon_0^{inic} = -\epsilon_i$ , como vimos en la sección 1.1, donde  $\epsilon_i$  es la primera energía de ionización. En el estado final, debido a que estamos analizando el canal de ionización, la energía está dada por el hamiltoniano libre dado en la ecuación 1.8. De esta manera, debido a la conservación de la energía, tenemos:

$$\frac{v^2}{2} - \epsilon_i = \frac{Mv_{cm}^2}{2} + \frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j}, \quad (2.1)$$

donde  $v_{cm}$  es el módulo de la velocidad  $\mathbf{v}_{cm}$  del centro de masas<sup>3</sup>,  $v$  es el módulo de la velocidad inicial  $\mathbf{v}$  del proyectil positrónico,  $k_j$  y  $K_j$  son los módulos de un par de momentos de Jacobi<sup>4</sup>  $\{\mathbf{k}_j, \mathbf{K}_j\}$ , y  $\{m_j, \mu_j\}$  son las masas reducidas<sup>5</sup> (con  $j = T, P, o N.$ ). Esta ecuación puede ser expresada en el sistema de centro de masas, restando a ambos miembros la energía correspondiente al mismo, representada por el primer término del segundo miembro. A partir de las ecuaciones 1.6 y 1.3, llegamos a:

$$\mu_T \frac{v^2}{2} - \epsilon_i = \frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j} , \quad (2.2)$$

Nos interesa encontrar el máximo valor del momento final del electrón en el sistema centro de masa. Para realizar este análisis utilizaremos el par de momentos de Jacobi  $\{\mathbf{k}_N, \mathbf{K}_N\}$ , que es el más adecuado ya que:

$$\mathbf{K}_N = \mathbf{k} - \mathbf{v}_{cm} , \quad (2.3)$$

Si en la ecuación 2.2 elegimos el par de momentos de Jacobi  $\{\mathbf{k}_N, \mathbf{K}_N\}$ :

$$\mu_T \frac{v^2}{2} - \epsilon_i = \frac{k_N^2}{2m_N} + \frac{K_N^2}{2\mu_N} ,$$

vemos que cuando  $k_N = 0$ , el movimiento del positrón respecto del blanco será nulo y por tanto, el electrón alcanzará la máxima energía cinética, en el sistema centro de masas. De esta manera, el valor máximo del módulo del momento  $K_N$  será:

$$K_N^2 = \mu_N (\mu_T v^2 - 2\epsilon_i) . \quad (2.4)$$

Luego, reemplazando 1.6, 1.3 y 2.3 en 2.4, obtenemos el espacio de momentos del electrón, el cual estará limitado a una esfera:

$$\left| \mathbf{k}_{max} - \frac{\mathbf{v}}{M} \right|^2 = \mu_N (\mu_T v^2 - 2\epsilon_i) ,$$

o equivalentemente:

$$\left| \mathbf{k}_{max} - \frac{\mathbf{v}}{2 + M_T} \right|^2 = \frac{1 + M_T}{2 + M_T} \left( \frac{1 + M_T}{2 + M_T} v^2 - 2\epsilon_i \right) , \quad (2.5)$$

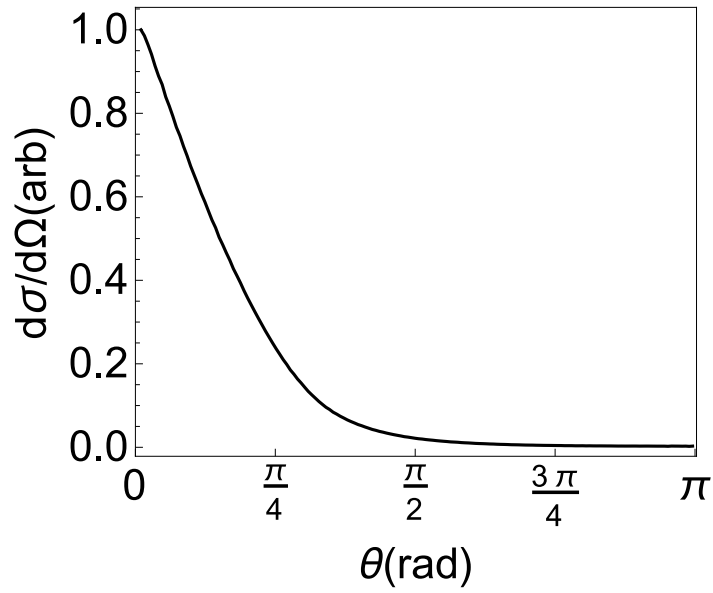
donde reemplazamos el valor de la masa total  $M$ , igual a la suma de las tres partículas, e introdujimos la cantidad  $\mathbf{k}_{max}$ , el máximo valor que puede adquirir el momento del

---

<sup>3</sup>Definida en la ecuación 1.3.

<sup>4</sup>Definidos en la ecuación 1.5.

<sup>5</sup>Definidas en las ecuaciones 1.6.



**Figura 2.3:** Sección eficaz diferencial  $d\sigma/dk$ , integrada en momento, en función del ángulo del electrón (en unidades arbitrarias), para la ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de  $100\text{ eV}$ .

electrón. Teniendo en cuenta la magnitud de la masa del núcleo:

$$M_T \approx 1836 ,$$

podemos aproximar 2.5, como:

$$k_{max} \approx \sqrt{2(E_i - \epsilon_i)} ,$$

donde  $E_i = v^2/2$ . La energía máxima que podrá alcanzar el electrón será por tanto,

$$E_{max} \approx E_i - \epsilon_i$$

Por último, en la figura 2.3, se muestra la sección eficaz diferencial  $d\sigma/dk$  en función del ángulo del electrón, e integrada en la energía donde se puede percibir que la mayoría de los electrones están enfocados en la dirección hacia delante.

### 2.2.2. Pico de electrones blandos

En el gráfico de intensidades representado en la figura 2.2, se puede apreciar que para  $E \approx 0$  se produce un máximo, el cual es denominado *pico de electrones blandos* o *SE* por su sigla en inglés<sup>6</sup>[37], o también *pico EEC*<sup>7</sup>[29]. El mismo está constituido por una gran emisión de electrones con baja energía, es decir, electrones que necesitaron

<sup>6</sup>Soft Electrons.

<sup>7</sup>Electron Emission to the Continuum.

una pequeña cantidad de intercambio de momento con el proyectil para escapar del blanco.

### 2.2.3. Orientación

En la figura 2.2 notamos además que la mayoría de los electrones alcanzan el estado final con una energía  $E < (E_{max}/2)$ . Este fenómeno, conocido como *orientación*, es atribuido a la interacción del protón residual con el dipolo electrón-positrón. En nuestro estudio de este fenómeno ([8, 9, 35, 36]), optamos por analizar además estos cálculos en términos del momento de Jacobi  $\mathbf{K}_P$ .

En la figura 2.4, representamos la sección eficaz en función de la energía  $E_P = K_P^2/2\mu_P$ , y el ángulo  $\theta_P$  de Jacobi. Allí vemos que no se presentan eventos de ionización para  $E_P > E_{max}$ , lo cual se puede deducir a partir de la ecuación de conservación de la energía 2.2, tomando el par de momentos de Jacobi  $\{\mathbf{k}_P, \mathbf{K}_P\}$ :

$$\mu_T \frac{v^2}{2} - \epsilon_i = \frac{k_P^2}{2m_j} + \frac{K_P^2}{2\mu_P} , \quad (2.6)$$

y considerando el caso en que  $k_P = 0$ , con lo cual llegamos a la condición para el máximo de  $E_P$ :

$$E_P^{max} = \frac{1 + M_T}{M_T + 2} \frac{v^2}{2} - \epsilon_i .$$

Teniendo en cuenta que  $M_T \approx 1836$ , esta última ecuación se puede aproximar como:

$$\begin{aligned} E_P^{max} &\approx \frac{v^2}{2} - \epsilon_i \\ &\approx E_{max} , \end{aligned} \quad (2.7)$$

Además, se observa que para una energía  $E_P < E_{max}/2$ , disminuye drásticamente la cantidad de eventos de ionización. Esta frontera se corresponde con la condición:

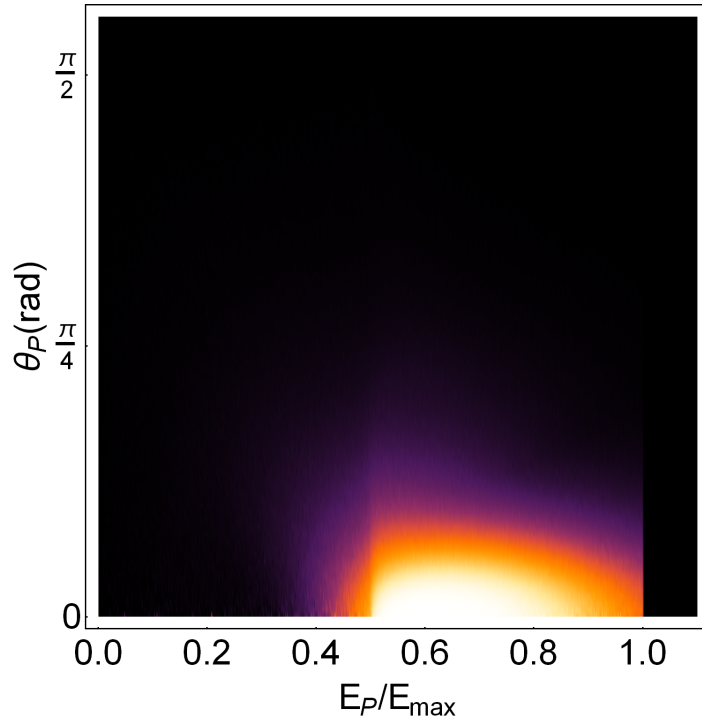
$$\frac{k_P^2}{2m_P} = \frac{K_P^2}{2\mu_P} = \frac{E_P^{max}}{2} .$$

Es decir que se favorece una situación en la cual:

$$\left| \dot{\mathbf{R}}_R - \frac{\dot{\mathbf{r}} + \dot{\mathbf{R}}}{2} \right| > \sqrt{\frac{\mu_P}{m_P}} \left| \dot{\mathbf{r}} - \dot{\mathbf{R}} \right| ,$$

o, de manera aproximada:

$$\left| \dot{\mathbf{R}}_R - \frac{\dot{\mathbf{r}} + \dot{\mathbf{R}}}{2} \right| > 2 \left| \dot{\mathbf{r}} - \dot{\mathbf{R}} \right| ,$$



**Figura 2.4:** Gráfico de intensidades de la sección eficaz de ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de  $100\text{ eV}$ , doble diferencial en el módulo del momento  $K_P$  y el ángulo  $\theta_P$ .

lo cual quiere decir que prevalece una cinemática del sistema en la cual la velocidad del ion en retroceso respecto del centro de masas electrón-positrón es mayor que la velocidad relativa entre ambas partículas. Esto significa que las partículas tienden a desplazarse con una baja velocidad relativa, lo cual implica que el ángulo entre los momentos de las mismas sea pequeño. La situación más favorecida por este fenómeno se dará por tanto cuando ambas partículas viajan exactamente en la misma dirección, es decir, colinealmente. Además, a partir de la figura 2.2, sabemos que el electrón viajará preferentemente por detrás del positrón. Este resultado es esperable debido a que la configuración en la cual el electrón se desplaza detrás del positrón (es decir, con menor velocidad y por tanto menor energía cinética que el positrón) minimiza la energía de interacción coulombiana entre las tres partículas.

Debido a su baja velocidad, el estudio del movimiento del ion en retroceso puede parecer anti-intuitivo a primera vista. Sin embargo, como vimos, puede proporcionar información que ayude a realizar una descripción detallada del movimiento del electrón y el positrón luego de la colisión. Por ejemplo, nos permitió discernir si las partículas livianas restantes se desplazan juntas o separadas. Y aún más, nos da información precisa acerca del espectro de ambas partículas y de la naturaleza de sus interacciones.

Este tipo de análisis fue originalmente propuesto teóricamente por Rodríguez *et al.*[38] para investigar colisiones protón-helio. Cinco años más tarde, estas predicciones fueron confirmadas experimentalmente usando un microscopio de reacción para obtener

la distribución del momento en retroceso (*RIM*, por su sigla en inglés <sup>8</sup>) para la componente paralela a la dirección de incidencia del proyectil.

En el caso de proyectiles livianos tales como los positrones, la alta probabilidad de deflexión del proyectil (comparada por ejemplo con la colisión por iones, que son tres órdenes de magnitud más masivos) complica tanto el análisis teórico como la factibilidad de confirmar experimentalmente las predicciones hechas por el mismo. Sin embargo, el avance en el desarrollo e implementación de *microscopios de reacción* positrónica está volviendo cada vez más accesible la obtención de una imagen cinemáticamente completa de las partículas involucradas en la colisión [4, 5], lo cual justifica este tipo de análisis. No obstante, el estudio de las secciones eficaces de ionización por impacto de positrones en el espacio de momentos del electrón continúa siendo central debido a que la mayoría de las técnicas hasta el momento se han concentrado en su detección, la cual es más sencilla que si se trabaja con el lento ion en retroceso. Por lo tanto, nuestro estudio del proceso de colisión continuará enfocándose en el espacio de momentos del electrón.

## 2.3. Resultados numéricos en la geometría colineal

Como mencionamos en la sección anterior, el efecto de la orientación del dipolo electrón-positrón será más pronunciado en la medida en que ambas partículas escapen más alineadas, lo cual hace interesante el estudio de esta restricción geométrica. Debido a esto, seleccionamos la geometría colineal, en la cual ambas partículas finalizan en la misma dirección, es decir  $\mathbf{k} \parallel \mathbf{K}$ , tal como se muestra esquemáticamente en la figura 2.5.

Numéricamente, la condición de colinealidad fue establecida contando los casos en que el positrón y el electrón finalizan con un ángulo entre ambos menor a  $5^\circ$ .

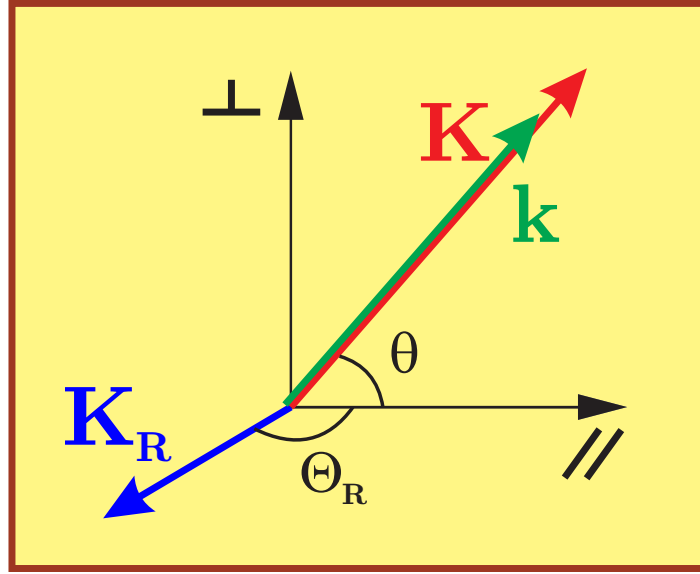
### 2.3.1. Sección eficaz para el caso colineal

En la figura 2.6 representamos en espacio energía-ángulo, los valores finales para las colisiones de ionización que cumplen la condición de colinealidad establecida. En ambos casos se escogió para cada punto un determinado radio y una opacidad, de modo tal que aquellas zonas en las que hayan sucedido más eventos se noten más oscuras, y aquellas en que hayan sucedido menos, más claras. No se realizó un gráfico de intensidades, como en la figura 2.2, debido a que la cantidad de puntos es dos órdenes de magnitud menor cuando se establece la condición de colinealidad, lo cual complica hacer la estadística necesaria para realizar un gráfico de ese tipo. Es muy notorio en este caso lo dramático del efecto de la orientación (sección 2.2.3), no percibiéndose casi ningún evento para energías mayores a  $E_{max}/2$ . Se puede ver cierta concentración de

---

<sup>8</sup>Recoil-Ion Momentum.





**Figura 2.5:** Geometría colineal: los momentos del electrón  $\mathbf{k}$  y el positrón  $\mathbf{K}$ , en el estado final, cumplen  $\mathbf{k} \parallel \mathbf{K}$ .

puntos alrededor de  $\theta = \pi/4$ , y también alrededor de  $E = E_{max}/2$ . Trataremos de comprobar estas observaciones integrando la sección eficaz primero en energía y luego en ángulo.

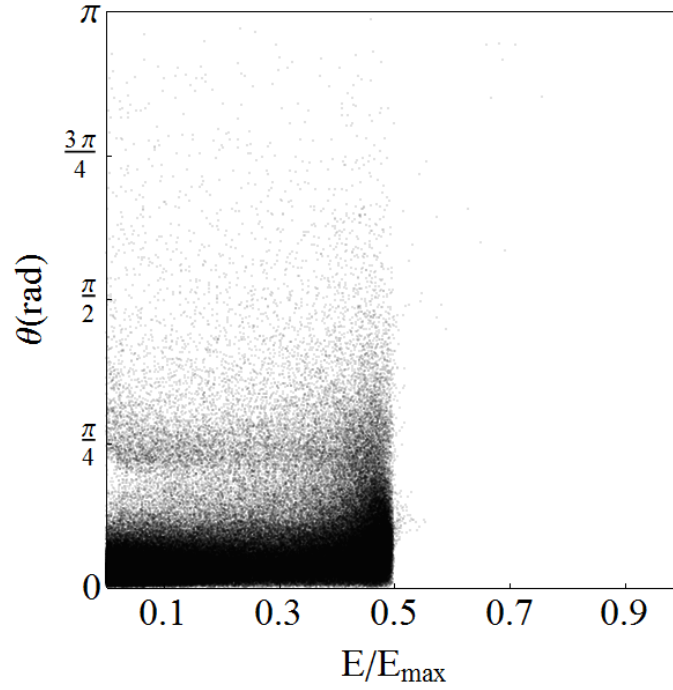
Si graficamos la sección eficaz diferencial  $d\sigma/d\mathbf{k}$ , integrada en ángulo, en función de la energía del electrón (figura 2.7), notamos además que muy cerca de la energía  $E_{max}/2$ , encontramos una estructura tipo pico. Éste último ha sido descrito ampliamente en la literatura ([39], [40],[6]), y es conocido como *pico de captura al continuo* o por abreviatura, pico *ECC* (*Electron Capture to the Continuum*, por su sigla en inglés). Éste se presenta también en el caso cuántico, como veremos en el capítulo 5[40].

Luego, si graficamos la sección eficaz diferencial  $d\sigma/d\mathbf{k}$  en función del ángulo del electrón (2.8), observamos que la distribución de partículas está fuertemente enfocada hacia delante. Notamos además la presencia de una pequeña estructura cerca de un ángulo  $\theta \approx 0.71 (\approx 41^\circ)$ . La existencia de la misma, puede deberse a la acción de un mecanismo de doble colisión binaria como el que describiremos en la próxima sección.

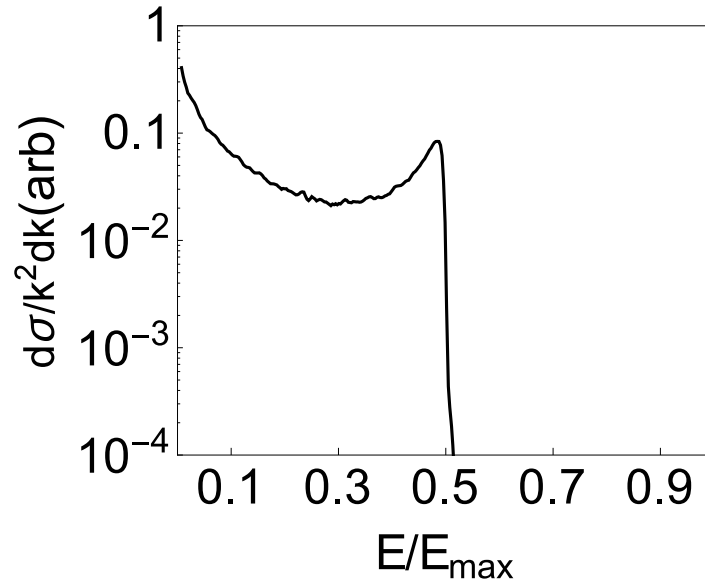
### 2.3.2. Mecanismo de Thomas

Un mecanismo de colisión doble binario es un proceso que puede dar lugar a estructuras en la sección eficaz. El mismo sólo se observaría en la geometría colineal, lo cual constituye otra razón para su elección.

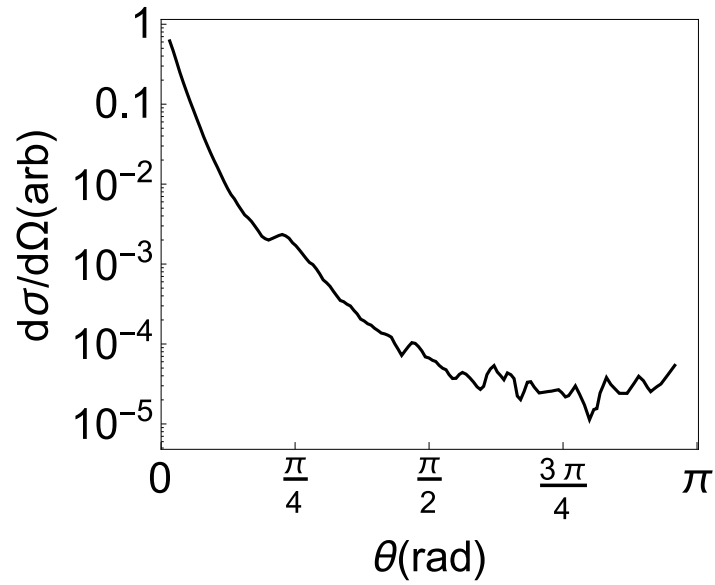
Un mecanismo doble binario posible es aquél en el cual el positrón impacta primeramente con el electrón y sale dispersado en dirección hacia el protón, mientras el electrón escapa con un ángulo  $\theta_a$ . Por conservación de energía y momento, este ángulo



**Figura 2.6:** Trayectorias ionizantes en la condición de colinealidad para la ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de  $100\text{ eV}$ , doble diferencial en la energía  $E$  y el ángulo  $\theta$  del electrón. El eje de la energía está normalizado por la máxima energía que puede adquirir el electrón  $E_{max}$ . Cada punto en el espacio  $E - \theta$  representa las coordenadas finales en este espacio para una determinada trayectoria. Cada punto posee la misma opacidad y el mismo radio, por lo cual las zonas más oscuras corresponden a la acumulación de trayectorias en esas zonas.



**Figura 2.7:** Sección eficaz diferencial  $d\sigma/dk$ , integrada en ángulo, en función de la energía del electrón (en unidades arbitrarias), para la ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de  $100\text{ eV}$ , en condiciones de colinealidad. El eje de energías está normalizado por la máxima energía que puede adquirir el electrón  $E_{max}$ .



**Figura 2.8:** Sección eficaz diferencial, integrada en momento, en función del ángulo del electrón (en unidades arbitrarias), para la ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de 100 eV, en condiciones de colinealidad.

está determinado por la cantidad de energía cinética que se lleva de la colisión :

$$\cos \theta_a = \frac{k^2 + \epsilon_i}{kv} . \quad (2.8)$$

Luego de esta primera colisión, el positrón choca elásticamente con el protón, y finalmente escapa en la misma dirección que el electrón, es decir con un ángulo  $\theta_a$ .

Debido a que la masa del protón es tres órdenes de magnitud mayor que la del positrón y el electrón, se lo considera fijo en el sistema de laboratorio, con lo cual la ecuación de conservación de la energía es simplemente:

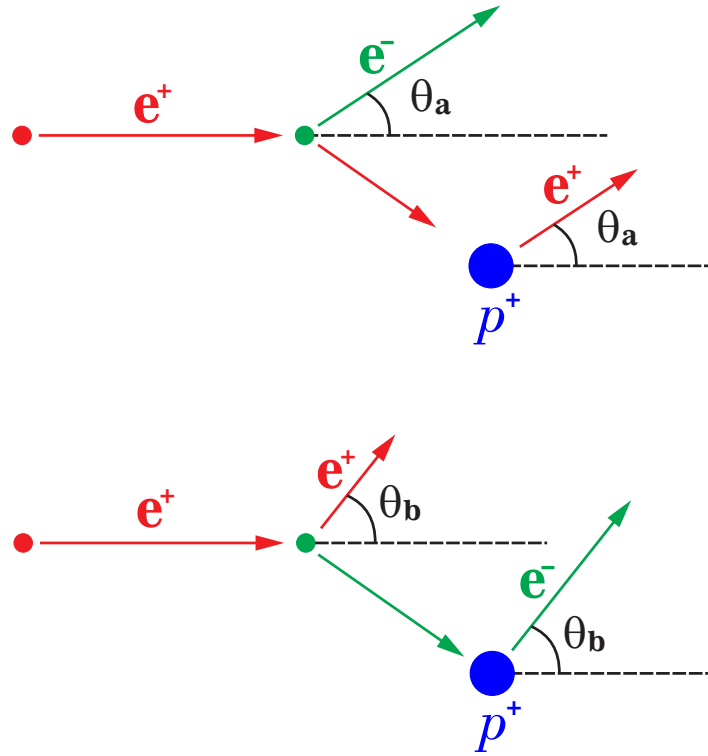
$$\frac{k^2}{2} + \frac{K^2}{2} = \frac{v^2}{2} - \epsilon_i . \quad (2.9)$$

Otro mecanismo similar al anterior es aquél en el cual el electrón y el positrón intercambian sus roles, y es el electrón quien es dispersado por el protón. Por conservación de energía y momento, el ángulo de salida de ambas partículas será:

$$\cos \theta_b = \frac{K^2 + \epsilon_i}{Kv} . \quad (2.10)$$

A partir de las tres ecuaciones anteriores se verifica que los ángulos  $\theta_a$  y  $\theta_b$  son iguales cuando  $k = K$ , resultando:

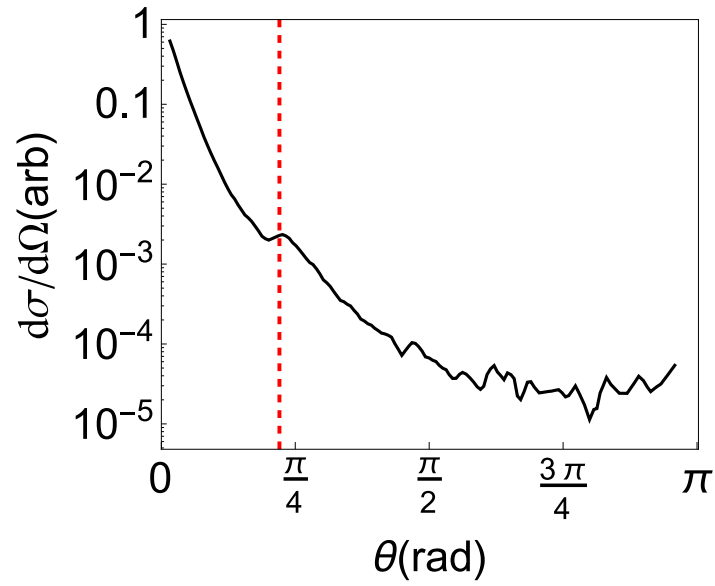
$$\cos \theta_a = \cos \theta_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\epsilon_i/v^2}} . \quad (2.11)$$



**Figura 2.9:** Diagrama esquemático del Mecanismo de Thomas, donde dos procesos distintos contribuyen a la ionización a un mismo ángulo.

Éste es el denominado *mecanismo de Thomas*, por el cual se espera un máximo en la sección eficaz debido a que estos dos procesos de doble colisión binaria contribuyen para una misma energía y ángulo del electrón. En la figura 2.9 representamos de manera esquemática este mecanismo.

Para altas energías de impacto ( $v^2/2 \gg \epsilon_i$ ), este ángulo tiende  $45^\circ = \pi/4$ , valor por ejemplo empleado en [41]. Sin embargo, para energías bajas e intermedias, el ángulo de Thomas puede diferir apreciablemente de este valor. Por ejemplo, para el caso del átomo de Helio, cuya primera energía de ionización es  $\epsilon_i = 24.6 \text{ eV}$ , para una energía de impacto de  $100 \text{ eV}$ , este ángulo es de aproximadamente  $35.5^\circ$ . Para el caso del  $H_2$  por incidencia de positrones de  $100 \text{ eV}$ , este ángulo es de aproximadamente  $39.7^\circ$ , muy cercano a la ubicación del pico de la figura 2.8. Como se puede apreciar en la figura 2.10, donde marcamos la ubicación predicha por el mecanismo de Thomas, existe una coincidencia aceptable entre este mecanismo y la estructura hallada, lo cual puede ser una explicación para la presencia de la misma.



**Figura 2.10:** Sección eficaz diferencial, integrada en momento, en función del ángulo del electrón (en unidades arbitrarias), para la ionización de moléculas  $H_2$  por impacto de positrones de  $100\text{ eV}$ , en condiciones de colinealidad. En línea a trazos roja se indica la posición angular predicha por el Mecanismo de Thomas.

## Capítulo 3

# Efectos cuánticos en colisiones positrón átomo

En este capítulo expondremos algunos conceptos fundamentales de la teoría cuántica de colisiones atómicas. Luego explicaremos el modelo de *onda distorsionada del continuo* (*CDW* por su sigla en inglés<sup>1</sup>), y su aplicación al problema cuántico de tres cuerpos. El mismo es un método *perturbativo*<sup>2</sup> y es más aplicable a energías intermedias y altas. Para la resolución numérica, nos valdremos nuevamente del sistema de coordenadas de Jacobi, que utilizamos en el capítulo 1 en el tratamiento clásico del problema. Empleamos una función de ondas *C3* para describir el estado final del sistema, la cual representa de manera adecuada el estado asintótico del canal de ionización. Además, a diferencia de otros, el método que implementamos tiene en cuenta la cinemática completa del problema, lo cual permite describir apropiadamente tanto fenómenos debidos a la interacción de dos, como de tres cuerpos.

Finalmente, mostraremos los resultados que se obtienen de aplicar el método *CDW* a un problema de ionización de *H* por impacto de positrones de 100 eV en una geometría colineal, tal como fuera estudiado en la sección 2.3 mediante un tratamiento clásico. Haremos un estudio comparativo de las principales similitudes y diferencias entre los resultados obtenidos con uno y otro método, y describiremos la presencia de una nueva estructura que se obtiene en el caso cuántico.

### 3.1. Colisiones Multicanales

Como ya describimos en la sección 1.6 del capítulo 1, se pueden presentar distintos *canales* en una colisión proyectil-átomo hidrogenoide, los cuales se clasifican según el

---

<sup>1</sup>Continuum Distorted Wave.

<sup>2</sup>Un método perturbativo ofrece una solución aproximada de un problema, a partir de la reducción del mismo a uno más sencillo, al cual van sumándose correcciones. Es muy similar en espíritu a expresar una función mediante una serie de Taylor.

tipo de fragmentos y su estado al final de la colisión. Las tres partículas intervinientes: proyectil ( $P$ ), núcleo ( $T$ ) y electrón ( $e$ ); interactúan entre sí a través de potenciales dependientes de las coordenadas relativas.

En el proceso de colisión puede producirse un reordenamiento de partículas, es decir que pueden existir estados ligados en el estado inicial que ya no estén presentes en el estado final y viceversa. Por lo tanto, el potencial relevante al inicio y al final de la colisión puede diferir.

### 3.1.1. Hamiltoniano de tres partículas

La evolución temporal del sistema de tres partículas estará dada por el operador hamiltoniano total de interacción coulombiana, cuya expresión es:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hat{p}_P^2}{2m_P} + \frac{\hat{p}_T^2}{2m_T} + \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + V_N + V_P + V_T \\ &= H_0 + V, \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde  $\hat{p}$  son los operadores de momento [42],  $V_j$  son los potenciales de Jacobi<sup>3</sup> (con  $j = T, P, N$ ), y  $H_0$  es el término de energía cinética, el cual proviene de sumar la energía cinética  $\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}$  de cada partícula. La evolución del sistema estará dada por este hamiltoniano a partir de la ecuación de Schrödinger como:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle,$$

donde  $|\psi(t)\rangle$  es un vector que pertenece al espacio de Hilbert de tres partículas que representa el estado del sistema a tiempo  $t$ . La solución de esta ecuación está dada por:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi\rangle \equiv U(t) |\psi\rangle,$$

donde  $|\psi\rangle$  representa el estado del sistema a tiempo  $t = 0$ , y  $U(t)$  es el denominado *operador de evolución temporal*.

### 3.1.2. Sección eficaz

Sea  $j$  un canal del sistema en el cual en el estado final se encuentra presente el potencial  $V_j$  ( $j = P, T, N$ ), se denomina *hamiltoniano de canal*  $H_j$  a:

$$H_j = H_0 + V_j.$$

---

<sup>3</sup>Ver ecuación 1.5.

Definiremos también un *potencial de canal*, como:

$$\mathcal{V}_j = V - V_j .$$

Denominaremos asíntotas entrante  $|\mathbf{p}_\alpha\rangle$  y saliente  $|\mathbf{p}_\beta\rangle$  al estado del sistema a tiempo  $t \rightarrow -\infty$  y  $t \rightarrow \infty$ , respectivamente. Sean  $|\mathbf{p}_\alpha^+\rangle$  y  $|\mathbf{p}_\beta^-\rangle$  las proyecciones de la asíntota entrante y saliente a tiempo  $t = 0$ , respectivamente, se cumplirá:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} U(t) |\mathbf{p}_\alpha^+\rangle = U^\alpha(t) |\mathbf{p}_\alpha\rangle ,$$

para la asíntota entrante, y:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} U(t) |\mathbf{p}_\beta^-\rangle = U^\beta(t) |\mathbf{p}_\beta\rangle ,$$

para la asíntota saliente, donde  $U^j(t) = e^{iH_j t}$ .

Sin hacer un desarrollo de la teoría cuántica de colisiones, el cual es standard y se encuentra en la literatura [43], podemos definir la amplitud de probabilidad  $w_{\alpha\beta}$ , como la proyección de las asíntotas entrante y saliente:

$$w_{\alpha\beta} = |\langle \mathbf{p}_\alpha^+ | \mathbf{p}_\beta^- \rangle|^2 .$$

Por medio de esta cantidad, se calcula la *sección eficaz completamente diferencial FDCS*, que es la integral de  $w_{\alpha\beta}$  sobre el parámetro de impacto  $\boldsymbol{\rho}$  del proyectil. Su expresión es:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}d\mathbf{K}d\mathbf{K}_R} = \frac{(2\pi)^4}{v} \delta(E_\alpha - E_\beta) |t_{\alpha\beta}|^2 , \quad (3.2)$$

donde  $v$  es la velocidad inicial del proyectil, y la presencia de la delta de Dirac asegura la conservación de la energía entre los estados inicial y final. En esta expresión es de central importancia el *elemento de matriz*  $t_{\alpha\beta}$ , el cual se calcula como:

$$t_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{p}_\beta^- | \mathcal{V}_\alpha | \mathbf{p}_\alpha^+ \rangle \quad \text{prior} . \quad (3.3)$$

Debido a que en esta expresión se utiliza el potencial de canal del estado inicial, se dice que este elemento de matriz está en su forma *prior*. El mismo también se puede definir como:

$$t_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{p}_\beta | \mathcal{V}_\beta | \mathbf{p}_\alpha^+ \rangle \quad \text{post} , \quad (3.4)$$

el cual se dice que está en su forma *post* debido a que en su cálculo se utiliza el potencial de canal del estado final.

La sección eficaz puede ser escrita también en término de los impulsos de Jacobi,



como:

$$\frac{d\sigma}{dkd\mathbf{K}d\mathbf{K}_R} = \delta(\mathbf{k} + \mathbf{K} + \mathbf{K}_R - \mathbf{v}) \frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_j d\mathbf{K}_j},$$

donde:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_j d\mathbf{K}_j} = \frac{(2\pi)^4}{v} \delta\left(\frac{k_j^2}{2m_j} + \frac{K_j^2}{2\mu_j} - \mu_T \frac{v^2}{2} + \epsilon_i\right) |t_{\alpha\beta}|^2.$$

## 3.2. Método CDW

A fin de hallar el elemento de matriz de una colisión positrón-átomo hidrogenoide<sup>4</sup>, el cual constituye un problema de tres cuerpos, podemos utilizar cualquiera de las dos expresiones que hallamos (3.4,3.3). Debido a que el estado inicial  $|\mathbf{p}_\alpha\rangle$ , se puede determinar de manera exacta, utilizaremos la forma prior, y haremos aproximaciones para  $|\mathbf{p}_\beta^- \rangle$ . Trabajaremos con el sistema de coordenadas de Jacobi.

### 3.2.1. Función de onda inicial

La función de onda del estado inicial, es la que corresponde al movimiento *libre* del positrón, acercándose desde el infinito a un átomo hidrogenoide en su estado fundamental. Es decir, en representación de coordenadas [41]:

$$\psi_i = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_\alpha \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{K}_T \cdot \mathbf{R}_T} \left( \frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-Z_T r_T} = e^{i\mu_T \mathbf{v} \cdot \mathbf{R}_T} \varphi(\mathbf{r}_T), \quad (3.5)$$

donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad inicial del proyectil, y definimos  $\varphi(\mathbf{r}_T) = (2\pi)^{-3/2} \left( \frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-Z_T r_T}$ . Debido a que inicialmente el blanco se encuentra en reposo en el sistema de laboratorio, se puede considerar que  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{R}} = \dot{\mathbf{R}}_T$ . Se utilizó además la siguiente propiedad del sistema de coordenadas de Jacobi:  $\mathbf{K}_T = \mu_T \dot{\mathbf{R}}_T$ .

### 3.2.2. Función de onda del estado final en la aproximación C3

En el método *CDW*, el cual ha sido objeto de profundos análisis [11–13], obtener la función de onda del estado final es la parte crucial en la resolución de este problema. Se exige que esta función cumpla la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo  $(H - E)\Psi = 0$ , con  $H$  dado por 3.1. Debido a que el estado final  $|\mathbf{p}_\beta^- \rangle$  es la proyección a  $t = 0$  de una asíntota saliente  $|\mathbf{p}_\beta \rangle$ , es esperable que la función de onda a  $t = 0$ , sea proporcional a una solución del continuo de dos cuerpos *electrón-núcleo*, multiplicada por un *factor de distorsión*, que tenga en cuenta las restantes interacciones.

En el modelo *C3* para la función de onda final del método *CDW*, propuesto por

---

<sup>4</sup>Concepto definido en el capítulo 1.

Garibotti y Miraglia [44], se propone una solución de tipo:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_P, \mathbf{r}_N | \mathbf{p}_\beta^- \rangle \approx \Psi_{C3} &= \frac{e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j + \mathbf{K}_j \cdot \mathbf{R}_j)}}{(2\pi)^3} \prod_{j=T,P,N} \Gamma(1 - i\nu_j) e^{-\pi\nu_j/2} {}_1F_1(i\nu_j; 1; -ik_j r_j - i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j) \\ &= \frac{e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j + \mathbf{K}_j \cdot \mathbf{R}_j)}}{(2\pi)^3} \prod_{j=T,P,N} D^-(\nu_j, \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j) , \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde  $\nu_j$  son los *parámetros de Sommerfeld*, definidos por:

$$\nu_T = -m_T Z_T / k_T \quad \nu_P = -m_P Z_P / k_P \quad \nu_N = m_N Z_P Z_T / k_N ,$$

y  $\Gamma$  es la función *Gamma*.

En la solución 3.6 introdujimos los factores de distorsión coulombianos  $D$ , definidos como:

$$D^\pm(\nu, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^\pm(\nu) {}_1F_1(\mp i\nu, 1, \pm ikr - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) ,$$

donde  ${}_1F_1$  es una función hipergeométrica confluyente de primer tipo que cumple la siguiente identidad:

$${}_1F_1^*(a, b, z) = {}_1F_1(a^*, b^*, z^*) , \quad (3.7)$$

. y  $N$  es el denominado *factor de Coulomb*, dado por:

$$N^\pm(\nu) = \Gamma(1 \pm i\nu) e^{-\pi\nu/2} , \quad (3.8)$$

Debido a que  $\Gamma^*(z) = \Gamma(z^*)$ , el mismo posee la siguiente propiedad:

$$(N^\pm(\nu))^* = N^\mp(\nu) . \quad (3.9)$$

A partir de 3.9 y 3.7, los factores de distorsión coulombianos cumplen:

$$D^{\mp*}(\nu, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = D^\pm(\nu, -\mathbf{k}, \mathbf{r}) .$$

### 3.2.3. Elemento de matriz

Partiendo de las ecuaciones 3.5 y 3.6, y teniendo en cuenta que el potencial de canal del estado inicial es:

$$\mathcal{V}_T = V - V_T = V_P + V_N ,$$

el elemento de matriz en su versión prior adquiere la siguiente expresión:

$$t_{if} = \langle \psi_{C3} | V_P + V_N | \psi_i \rangle \quad (3.10)$$

$$= \langle \psi_{C3} | V_P | \psi_i \rangle + \langle \psi_{C3} | V_N | \psi_i \rangle \quad (3.11)$$

$$= t_P + t_N , \quad (3.12)$$

donde  $t_P$  y  $t_N$ , son los elementos de matriz correspondientes a la interacción electrón-proyectil y proyectil-blanco, respectivamente.

El elemento de matriz  $t_P$  se puede expresar como:

$$\begin{aligned} t_P &= \int \int d\mathbf{r}_P d\mathbf{r}_T \frac{e^{-i(\mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T + \mathbf{K}_T \cdot \mathbf{R}_T)}}{(2\pi)^3} \prod_{j=T,P,N} D^{-*}(\nu_j, \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j) \left( -\frac{Z_P}{r_P} \right) e^{i\mu_T \mathbf{v} \cdot \mathbf{R}_T} \varphi(\mathbf{r}_T) \\ &= -\frac{Z_P}{(2\pi)^3} \int \int d\mathbf{r}_P d\mathbf{r}_T e^{-i(\mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T + (\mathbf{K}_T - \mu_T \mathbf{v}) \cdot \mathbf{R}_T)} \\ &\quad \times \prod_{j=T,P,N} D^+(\nu_j, -\mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j) \left( \frac{1}{r_P} \right) \varphi(\mathbf{r}_T) . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Teniendo en cuenta la siguiente relación que cumplen las coordenadas de Jacobi:

$$\mathbf{R}_T = \frac{m_T}{m} \mathbf{r}_T - \mathbf{r}_P ,$$

y definiendo el *momento transferido*  $\mathbf{Q}$ , el cual es la diferencia entre el momento inicial y final del proyectil, en este caso:

$$\mathbf{Q} = \mu_T \mathbf{v} - \mathbf{K}_T ,$$

podemos expresar el factor exponencial que aparece en el integrando en 3.13 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T + (\mathbf{K}_T - \mu_T \mathbf{v}) \cdot \mathbf{R}_T &= \mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T - \mathbf{Q} \cdot \left( \frac{m_T}{m} \mathbf{r}_T - \mathbf{r}_P \right) \\ &= \left( -\frac{m_T}{m} \mathbf{Q} + \mathbf{k}_T \right) \cdot \mathbf{r}_T + \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_P . \end{aligned}$$

De este modo, la integral 3.13 queda expresada como:

$$\begin{aligned} t_P &= -\frac{Z_P}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r}_P \frac{e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_P}}{r_P} D^+(\nu_P, -\mathbf{k}_P, \mathbf{r}_P) \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}_T e^{i\left(\frac{m_T}{m} \mathbf{Q} - \mathbf{k}_T\right) \cdot \mathbf{r}_T} D^+(\nu_T, -\mathbf{k}_T, \mathbf{r}_T) D^+(\nu_N, -\mathbf{k}_N, \mathbf{r}_N) \varphi(\mathbf{r}_T) . \end{aligned}$$

Debido a la definición de los momentos de Jacobi, podemos deducir la siguiente iden-

tividad:

$$\mathbf{r}_T - \mathbf{r}_P = \mathbf{r}_N .$$

A partir de esta identidad, extrayendo de la integral los factores de Coulomb debido a que no tienen dependencia espacial, y utilizando la forma explícita de la función de onda inicial, llegamos a:

$$\begin{aligned} t_P = & -\frac{Z_P}{(2\pi)^{9/2}} \left( \frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} \prod_{j=T,P,N} N^+(\nu_j) \int d\mathbf{r}_P \frac{e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_P}}{r_P} {}_1F_1(-i\nu_P; 1; i(k_P r_P + \mathbf{k}_P \cdot \mathbf{r}_P)) \\ & \times \int d\mathbf{r}_T e^{i\left(\frac{m_T}{m} \mathbf{Q} - \mathbf{k}_T\right) \cdot \mathbf{r}_T} e^{-Z_T r_T} {}_1F_1(-i\nu_T; 1; i(k_T r_T + \mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T)) \\ & \times {}_1F_1(-i\nu_N; 1; i(k_N |\mathbf{r}_T - \mathbf{r}_P| + \mathbf{k}_N \cdot (\mathbf{r}_T - \mathbf{r}_P))) . \end{aligned} \quad (3.14)$$

De manera similar, se puede obtener para el elemento de matriz  $t_N$  la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} t_N = & \frac{Z_P Z_T}{(2\pi)^{9/2}} \left( \frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} \prod_{j=T,P,N} N^+(\nu_j) \int d\mathbf{r}_N \frac{e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_N}}{r_N} {}_1F_1(-i\nu_N; 1; i(k_N r_N + \mathbf{k}_N \cdot \mathbf{r}_N)) \\ & \times \int d\mathbf{r}_T e^{-i\left(\frac{m_T}{M_T} \mathbf{Q} + \mathbf{k}_T\right) \cdot \mathbf{r}_T} e^{-Z_T r_T} {}_1F_1(-i\nu_T; 1; i(k_T r_T + \mathbf{k}_T \cdot \mathbf{r}_T)) \\ & \times {}_1F_1(-i\nu_P; 1; i(k_P |\mathbf{r}_T - \mathbf{r}_N| + \mathbf{k}_P \cdot (\mathbf{r}_T - \mathbf{r}_N))) . \end{aligned} \quad (3.15)$$

### 3.2.4. Elemento de matriz reducido

Como ya mencionamos, y se puede notar de 3.14 y 3.15, los factores de Coulomb no se involucran en la integración correspondiente al cálculo de los elementos de matriz, por lo tanto en ciertos análisis los mismos pueden ser tomados en cuenta por separado sin perder generalidad. De hecho, debido a que el factor:

$$N_{tot}^+ = \prod_{j=T,P,N} N^+(\nu_j) , \quad (3.16)$$

es común a las ecuaciones 3.14 y 3.15, se puede definir un elemento de matriz reducido  $\tilde{t}_{if}$ , como:

$$t_{if} = \tilde{t}_{if} \prod_{j=T,P,N} N^+(\nu_j) , \quad (3.17)$$

forma que será de utilidad la próxima sección.

## 3.3. Resultados mediante el método CDW

En los capítulos 1 y 2, desarrollamos un tratamiento clásico de las colisiones atómicas. Éste permite un análisis cualitativo de algunos mecanismos de colisión, e incluso en

cierto rango de energías puede dar buenas predicciones experimentales. Sin embargo, la descripción teórica más completa disponible será aquella dada por la teoría cuántica, la cual desarrollamos en el presente capítulo.

En esta sección investigaremos las estructuras que aparecen en la sección eficaz de ionización de  $H$ , mediante cálculos cuánticos. Al igual que en el capítulo 2, analizaremos una colisión para una energía de impacto del positrón de  $100\text{ eV}$ . Este análisis nos permitirá hacer una comparación entre las estructuras presentes en uno y otro caso. Si bien expondremos resultados para el caso de la colisión con  $H$ , este estudio es muy similar al caso de la colisión con hidrógeno molecular ( $H_2$ ), ya que se modela a ambas partículas como átomos hidrogenoides (ver sección 1.1). Por lo tanto, las diferencias en el tratamiento de ambos provienen de sus distintas energías de ionización, las cuales por cierto son muy próximas ( $\epsilon_i = 13.6\text{ eV}$  para el  $H$  y  $\epsilon_i = 15.4\text{ eV}$  para el  $H_2$ ), y en que en el cálculo de la sección eficaz de  $H_2$  la misma se debe multiplicar por 2 debido a la aproximación de electrones activos vista en 1.1. Esto último se debe simplemente a que en el caso del  $H_2$  consideramos a cada centro dispersor hidrogenico como un átomo independiente.

### 3.3.1. Resultados para una energía de $100\text{ eV}$

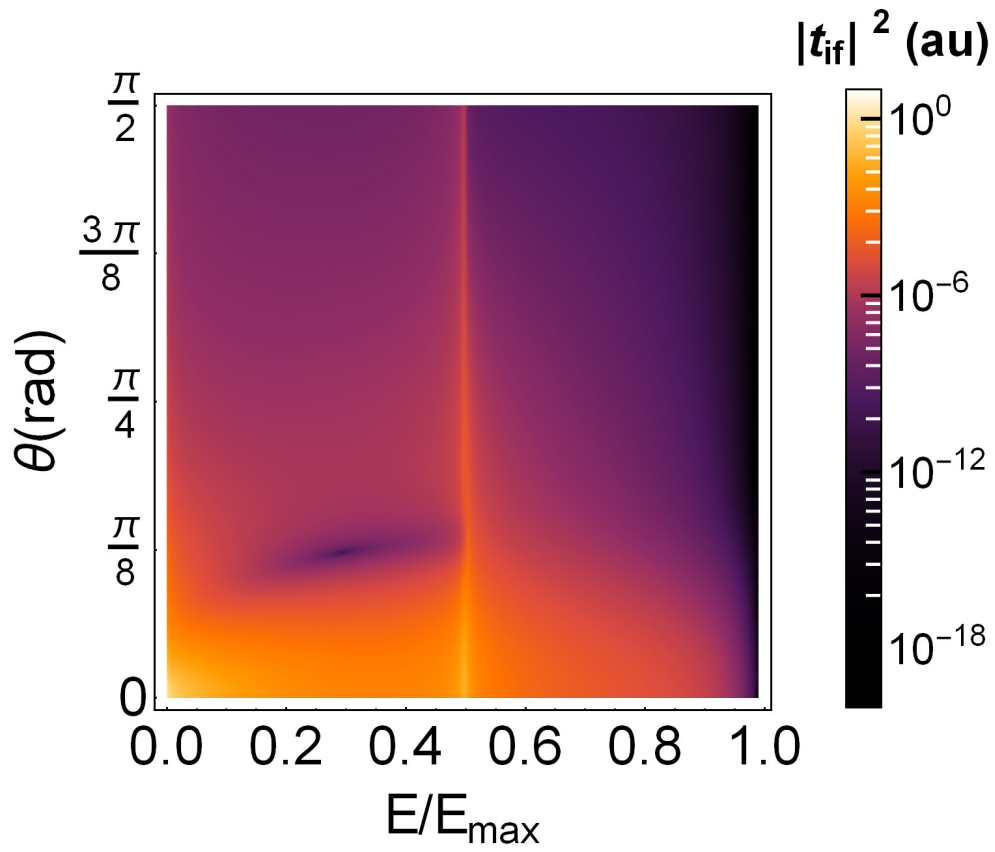
En la figura 3.1 se muestra el elemento de matriz de ionización<sup>5</sup> en espacio energía-ángulo final del electrón para la colisión positrón- $H$  (en geometría colineal). Allí podemos identificar ciertas estructuras ya presentes en el análisis clásico de la sección 2.3.1. El límite cinemático a energía  $E_{max}$  es idéntico al del caso clásico, lo cual se aprecia en esta figura debido a la abrupta disminución de  $|t_{if}|^2$  al aproximarnos a esta energía, luego de la cual se anula. Para  $E \approx E_{max}/2$  podemos observar un máximo denominado pico de captura al continuo *ECC* [6, 29, 40], el cual se presenta también en el caso clásico, como vimos en la sección 2.3.1.

Las principales características del pico *ECC* en el espacio de momentos tanto del electrón, como del ion en retroceso han sido investigadas teórica [7, 8] y experimentalmente [45]. Éste fue descrito primeramente para impacto de iones [39] como un máximo debido a la captura de un electrón del blanco por parte del proyectil a un estado del continuo del mismo. Como el electrón es emitido con una velocidad próxima a la del proyectil, éste produce una fuerte distorsión de su función de onda, de manera tal que ya no puede ser descrita adecuadamente por una onda plana, sino por una onda coulombiana del continuo, lo cual da lugar a una divergencia de tipo  $1/|\mathbf{v}_P - \mathbf{v}_e|$  en el elemento de matriz [46], siendo  $\mathbf{v}_e$  y  $\mathbf{v}_P$  las velocidades del electrón y el proyectil en el estado final.

Cuando el proyectil es pesado, éste no desvía casi su trayectoria al colisionar, y

---

<sup>5</sup>Ver ecuación 3.2.



**Figura 3.1:** Módulo cuadrado de la amplitud del elemento de matriz  $|t_{if}|^2$  para la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un positrón de 100 eV. Las condiciones están fijadas en una configuración de geometría colineal, discutida en la sección 1.8.  $E/E_{max}$  es la energía del electrón  $E$  normalizada por la máxima energía que puede adquirir  $E_{max}$ , y  $\theta$  su ángulo de salida respecto de la dirección de incidencia del positrón.

por lo tanto esta estructura se presenta como un pico agudo en la velocidad inicial del mismo. En el caso del impacto por positrones, como la cantidad de movimiento que le transfiere al núcleo es muy pequeña<sup>6</sup>, electrón y positrón comparten en partes iguales casi la totalidad de la energía máxima disponible  $E_{max} \approx v^2/2 - 2\epsilon_i$ , debido a que poseen igual masa. Ésta es la razón de que este pico aparezca 'desparramado' radialmente, ya que la condición  $|\mathbf{v}_P - \mathbf{v}_e| = 0$  se cumple en un círculo de radio  $v_e \approx k_{max}/\sqrt{2}$ .

Para una energía  $E \approx 0$  se observa un máximo en la sección eficaz debido a los denominados electrones lentos ( $SE$ ), cuyo origen es el mismo que el del pico  $ECC$ . Es decir, es debido a la interacción coulombiana en el estado final, pero en este caso del electrón con el núcleo.

Además de las estructuras mencionadas, podemos ver un mínimo en la sección eficaz, para una energía  $E/E_{max} \approx 0.3$  y un ángulo  $\theta \approx 0.4$ . En la sección 2.3.2, introdujimos el mecanismo de Thomas, el cual es un proceso que consiste en dos colisiones binarias para las cuales las partículas terminan con el mismo momento. A su vez, debido a que hay dos procesos diferentes que pueden contribuir al mismo ángulo y momento final del electrón (ver figura 2.9), los mismos podrían interferir en el caso cuántico, dando lugar a un mínimo en lugar de un máximo. No obstante, este mecanismo predice un máximo para una energía  $E/E_{max} \approx 0.5$  y un ángulo  $\theta \approx 0.8$ . Por lo tanto, no es una explicación satisfactoria para la presencia de esta estructura. En la próxima sección intentaremos dar una explicación a la misma, por medio de otro mecanismo clásico de colisión.

### 3.3.2. Electrones de ensilladura

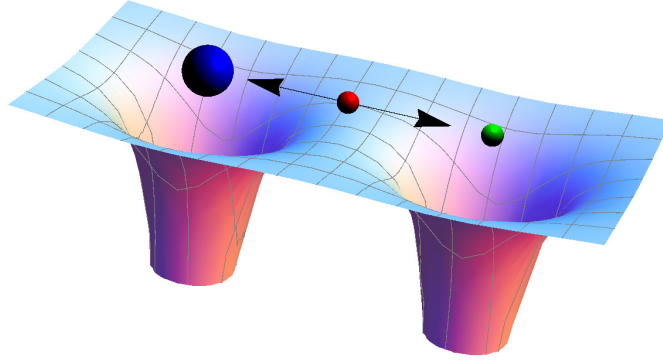
De manera similar a como hicimos en la sección 1.8, para explicar el mecanismo de Thomas, se puede proponer otro mecanismo clásico de doble colisión binaria para explicar el mínimo presente en la figura 3.1.

En el mismo, luego de la colisión, el electrón tiende a ubicarse en el *punto silla*[47] del potencial electrostático originado por el núcleo y el positrón, como se muestra esquemáticamente en la figura 3.2. Allí mostramos en un mismo gráfico tanto la forma del potencial electrostático como las partículas intervinientes, y vectores que representan las fuerzas electrostáticas en la dirección de escape debidas a las cargas positivas de igual magnitud equidistantes al electrón, lo cual garantiza el equilibrio inestable de tal punto en dicha dirección, y estable en la dirección perpendicular.

Sea  $\mathbf{r}_0$  el punto de equilibrio electrostático entre las fuerzas ejercidas por el positrón y el núcleo sobre el electrón, podemos expresar matemáticamente la condición

---

<sup>6</sup>Debido a que la masa del núcleo es más de tres órdenes de magnitud mayor que la del positrón y el electrón.



**Figura 3.2:** Mecanismo doble binario de electrones de ensilladura. El electrón (rojo) se ubica equidistante tanto al positrón (verde) como al núcleo (azul). La fuerza electrostática en el punto medio entre las posiciones del positrón y el núcleo se halla un punto de equilibrio inestable en la dirección positrón-núcleo, e inestable en la dirección perpendicular a ésta.

correspondiente a los electrones de ensilladura como:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{R}|^2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{R}_R|^2} = 0. \quad (3.18)$$

Si tenemos en cuenta que asintóticamente las partículas se desplazan con movimiento uniforme, la ecuación (3.18) queda:

$$|\mathbf{k}_0 - \mathbf{K}|^2 = \left| \mathbf{k}_0 - \frac{\mathbf{K}_R}{M_T} \right|^2$$

Por lo tanto, si despreciamos los términos de orden  $1/M_T$  y  $1/M_T^2$  ( $M_T \approx 1836$ ), llegamos a la condición  $k_0 = K/2$ . Si reemplazamos este resultado en la ecuación 2.9, llegamos a:

$$k_0 = \sqrt{\frac{v^2 - 2\epsilon_i}{5}},$$

que corresponde a una energía:

$$E_0 = \frac{E_{max}}{5}.$$

Por otra parte, el ángulo correspondiente a este mecanismo será:

$$\theta_0 = \cos^{-1} \frac{4v^2 + 3\epsilon_i}{2\sqrt{5}v\sqrt{v^2 - 2\epsilon_i}} = 0.42$$

De esta manera vemos que el ángulo al que se produce este mecanismo está de acuerdo con el encontrado con el cálculo cuántico, sin embargo para la energía predicha por el mismo la coincidencia es menor. Además, en los resultados numéricos obtenidos en el caso clásico no se pudo observar ninguna estructura que evidenciara de manera



concluyente la presencia de tal proceso de colisión, si bien esto podría deberse a la baja cantidad de trayectorias que quedan disponibles del cálculo total cuando establecemos la condición de colinealidad.

La presencia de este mínimo motivó una extensa búsqueda bibliográfica que nos hizo considerar la posibilidad de que este mínimo no fuera meramente tal, sino que fuera estrictamente un cero aislado del elemento de matriz  $t_{if}$ . Estos ceros aislados pueden ser interpretados mediante la formulación de la mecánica cuántica denominada *Mecánica de Bohm*[14], que desarrollaremos en el capítulo 4.

# Capítulo 4

## Mecánica Bohmiana

### 4.1. Introducción

La denominada *Interpretación de Copenhague* de la mecánica cuántica, es una convención para interpretar los resultados matemáticos que se obtienen a partir de la misma. Fue desarrollada principalmente entre los años 1925 y 1927 por científicos que hicieron grandes contribuciones teóricas en el campo, entre ellos los más destacados fueron Niels Bohr, Max Born y Werner Heisenberg.

En esta interpretación, se da un significado puramente estadístico a la función de onda que se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger, lo cual se encuentra en concordancia con los resultados experimentales. Por ejemplo, un patrón de interferencias en una pantalla resultado de un experimento de colisión se considera originado a partir de una serie de eventos aleatorios, y el módulo cuadrado de la función de onda predice correctamente en dónde se encontrará con más probabilidad una partícula luego de una colección de eventos.

Si bien esta interpretación probabilística que confiere un significado estadístico a la función de onda es adecuada para describir resultados experimentales, esto no excluye que la función de onda pueda poseer otras propiedades conectadas con el proceso de colisión. De esta manera, más allá de establecer un algoritmo para correlacionar de manera eficiente los resultados estadísticos del experimento, se podría postular que la distribución característica de puntos en una pantalla son la evidencia de cómo las partículas son guiadas de manera que estadísticamente terminan generando un patrón.

La teoría cuántica, denominada por algunos autores como *Mecánica de Bohm* [14, 48], nos permite entender los resultados experimentales principalmente en términos de una serie de eventos individuales originados de manera causal por medio de la función de onda. En esta teoría, la probabilidad es introducida como una propiedad secundaria de esta colección de eventos causales. Esta formulación de la mecánica cuántica también utiliza la ecuación de Schrödinger, por lo tanto los resultados matemáticos que se

obtienen a partir de ella son idénticos a los que se obtienen dentro de la interpretación de Copenhague. El elemento adicional que se introduce es una partícula que, al igual que en la mecánica clásica, posee una trayectoria definida y continua en el espacio y el tiempo. Haciendo una analogía clásica se puede pensar que las partículas son 'empujadas' por la onda, si bien esta fuerza no es de la misma naturaleza que las fuerzas mecánicas.

## 4.2. Formulación matemática

Como mencionamos en la sección anterior, la mecánica bohmiana parte también de la ecuación de Schrödinger, la cual para un sistema de una partícula de masa  $m$  y posición  $\mathbf{r}$ , en un potencial real  $V(\mathbf{r}, t)$ , como:

$$\left( -\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} . \quad (4.1)$$

Si definimos la densidad de probabilidad  $\rho = \psi \psi^*$  y utilizamos la ecuación 4.1, obtenemos la denominada *ecuación de continuidad*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 ,$$

donde hemos omitido la dependencia en  $\mathbf{r}$  y  $t$  por simplicidad, y hemos definido un *campo de velocidades*:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{m} \text{Im} \left[ \frac{\nabla \psi}{\psi} \right] , \quad (4.2)$$

Este campo es central en la mecánica de Bohm. A partir de él, se establece la ecuación que la distingue de la mecánica cuántica en la interpretación de Copenhague:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) . \quad (4.3)$$

Es decir, el campo de velocidades determina en cada punto del espacio y a cada tiempo la velocidad de una partícula cuya función de onda obedece 4.1. Este hecho convierte a la mecánica de Bohm en una teoría causal, ya que las partículas están dotadas de una trayectoria determinada por las condiciones iniciales y dicho campo de velocidades. Esto no significa, sin embargo, que los resultados de esta teoría difieran de los de la interpretación de Copenhague ya que comparten la misma base matemática que es la ecuación de Schrödinger.

Es importante destacar que esta teoría se puede expresar en una forma matemática similar a la teoría de *Hamilton-Jacobi* de la mecánica clásica, excepto por un término, el cual posibilita la aparición de fenómenos cuánticos. En la teoría de Hamilton-Jacobi,

el comportamiento del sistema viene dado por la siguiente ecuación homónima:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + V + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 = 0 , \quad (4.4)$$

y la siguiente *Ecuación de Continuidad*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla \cdot (\rho \nabla S) = 0 ,$$

donde hemos utilizado la notación:  $(\nabla S)^2 = \nabla S \cdot \nabla S$ . La cantidad  $S$  es denominada *acción*. La misma determina la trayectoria de las partículas:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\nabla S}{m} ,$$

a partir de la posición inicial  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0)$ .

A fin de formular la ecuación de Schrödinger de una manera similar, debemos expresar la función de onda en su forma polar<sup>1</sup>:

$$\psi = R e^{iS} . \quad (4.5)$$

Luego introducimos la función de onda escrita de esta forma en la ecuación del Schrödinger dependiente del tiempo (4.1):

$$\left[ \left( -i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial t} \right) - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 \right] R = 0 . \quad (4.6)$$

Tomando las partes real e imaginaria de la ecuación 4.6, obtenemos:

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{1}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} + V + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 = 0 \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla \cdot (\rho \nabla S) = 0 ,$$

donde  $\rho(\mathbf{r}, t) = R^2(\mathbf{r}, t)$ . Podemos notar que la ecuación 4.7 es similar a la ecuación de Hamilton-Jacobi de un sistema clásico, excepto por un término, denominado *Potencial Cuántico*:

$$V_Q(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2m} \frac{\nabla \rho^{1/2}}{\rho^{1/2}} ,$$

ya que la presencia del mismo es la que da origen a fenómenos propios de la mecánica cuántica como el *efecto túnel* o la interferencia en el experimento de doble rendija [42]. Para continuar con nuestra analogía cuántica de la teoría de Hamilton-Jacobi,

---

<sup>1</sup>Debido a lo cual se la suele denominar también como *fase*.

definimos un campo vectorial:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\nabla S}{m}, \quad (4.8)$$

el cual es idéntico al campo de velocidades 4.2 introducido anteriormente y que permite calcular un 'ensamble' de trayectorias.

La descripción de ciertos procesos cuánticos es más sencilla y natural a partir de este desarrollo similar al de *sistemas dinámicos*, tal como describiremos en la próxima sección.

Es importante destacar además que es posible realizar la deducción hecha en esta sección en sentido inverso, y describir la ecuación de Schrödinger a partir de una ecuación de Hamilton-Jacobi con un potencial dependiente de la densidad, tal como hicieron *Madelung* [49], y *Takabayashi* [50]. Ellos plantearon el desarrollo en base a una descripción de fluidos, la cual dejamos en el apéndice B para su consulta.

### 4.3. Algunas nociones básicas de la Teoría de Sistemas Dinámicos

La evolución de un sistema se puede describir con dos enfoques: el *lagrangiano* y el *euleriano*. En el enfoque lagrangiano uno se concentra en la historia de una partícula del ensamble que en el instante  $t = 0$  se encontraba en la posición  $\mathbf{r}_0$ . De este modo, se describe su movimiento a lo largo de la trayectoria  $\mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t)$ , donde  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(\mathbf{r}_0, 0)$ .

En el enfoque euleriano, uno se interesa por el movimiento de las partículas del ensamble en una posición  $\mathbf{r}$  a un tiempo  $t$ , y no por el movimiento individual de las partículas que lo componen. Nosotros vamos a describir al ensamble en esta sección con el enfoque euleriano.

#### 4.3.1. Líneas de corriente

Las curvas instantáneas tangentes a la dirección del campo de velocidades 4.8 son denominadas *líneas de corriente*.

Sea  $d\mathbf{s} = (dx, dy, dz)$  un elemento de arco a lo largo de una línea de corriente y  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$ , el vector de velocidad local. Luego, por definición:

$$\frac{dx}{u_x} = \frac{dy}{u_y} = \frac{dz}{u_z}.$$

Lo cual corresponde a:

$$\mathbf{u} \times d\mathbf{s} = 0.$$

En casos no estacionarios, estas líneas de corriente varían con el tiempo, y las trayec-

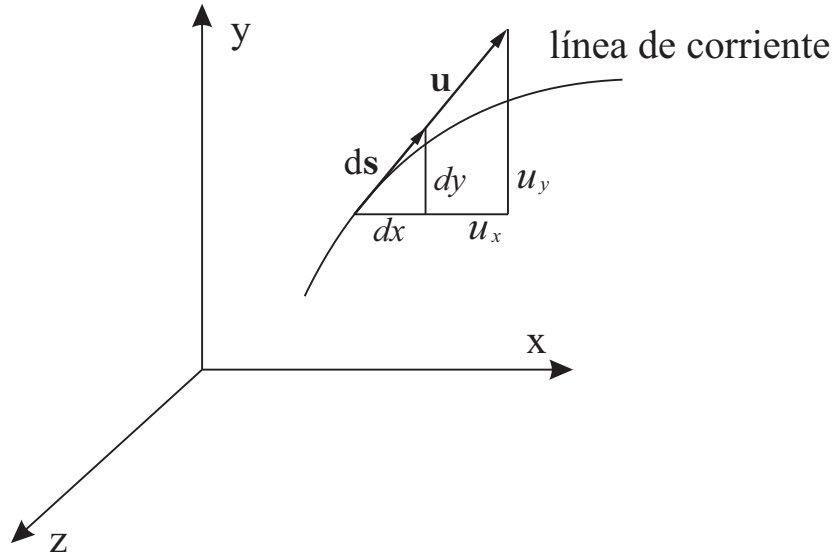


Figura 4.1: Línea de corriente.

torias no coincidirían con las mismas. Sólo en casos estacionarios ambas son idénticas.

### 4.3.2. Vorticidad y Circulación

Se define el vector *vorticidad* asociado al campo de velocidades como:

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} .$$

Estrechamente relacionado al concepto de vorticidad está el de *circulación*, que se define como la integral de línea de la componente tangencial de la velocidad:

$$\Gamma \equiv \oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{s} , \quad (4.9)$$

donde  $d\mathbf{s}$  es un elemento diferencial del contorno cerrado  $C^2$ .

Utilizando ahora el *Teorema de Stokes*[51]:

$$\oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{s} = \int_W (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot d\mathbf{W} , \quad (4.10)$$

donde  $W$  es el área encerrada por  $C$ , obtenemos:

$$\Gamma = \int_W \boldsymbol{\omega} \cdot d\mathbf{W} \quad (4.11)$$

Por lo tanto la vorticidad en un punto se puede interpretar como la circulación por unidad de área.

Como en el problema bajo estudio el campo de velocidades está dado por el gra-

---

<sup>2</sup>El círculo en la integral es una notación que indica que el contorno es cerrado

diente de una función escalar  $S$ , entonces:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{0} .$$

Por lo tanto el flujo asociado al ensamble de partículas de un sistema cuántico es irrotacional. Y en consecuencia la circulación alrededor de cualquier circuito cerrado es nula excepto en ciertos casos que veremos a continuación.

## 4.4. Vórtices tipo cuerpo rígido, e irrotacional

Los flujos que se desarrollan en líneas de corriente circulares se denominan *vórtices* (del inglés *vortex flows*). De ellos se pueden destacar dos tipos principales, aquél con rotación tipo *cuerpo rígido* y el *vórtice irrotacional*.

Un ejemplo del primero está dado por una velocidad tangencial proporcional al radio con respecto al origen de las líneas de corriente. El campo de velocidades de un flujo de este tipo, en coordenadas cilíndricas, tiene la siguiente expresión:

$$u_\theta = \frac{\omega r}{2}, \quad u_r = 0, \quad u_z = 0 ,$$

donde  $\omega$  es una constante. La circulación alrededor de un contorno de radio  $r$  en este fluido será:

$$\Gamma = \int \mathbf{u} \cdot d\mathbf{s} = \int_0^{2\pi} u_\theta r d\theta = 2\pi r u_\theta = 2\pi r^2 \omega_0 ,$$

lo cual muestra que la circulación es la vorticidad  $\omega$  multiplicada por el área.

Un ejemplo del segundo está dado por un campo de velocidades tangencial e inversamente proporcional al radio de las líneas de corriente:

$$u_\theta = \frac{C}{r}, \quad u_r = 0, \quad u_z = 0 . \quad (4.12)$$

Alrededor de un contorno de radio  $r$ , la circulación será:

$$\Gamma = \int_0^{2\pi} u_\theta r d\theta = 2\pi C .$$

Lo que muestra que la circulación es constante e independiente del radio. De hecho este es el valor de la circulación de cualquier contorno que encierre al origen, y se puede demostrar que será cero para cualquier otro contorno que no lo contenga. De la ecuación 4.11 podemos deducir ciertas características de este tipo de flujo para un contorno que encierre el eje  $z$ . Mediante un proceso de límite, si evaluamos  $\Gamma$  para  $W \rightarrow 0$ , vemos que para un infinitésimo de área  $\delta \mathbf{W}$  cercano al origen, el producto  $\boldsymbol{\omega} \cdot \delta \mathbf{W}$  debe ser finito, lo cual implica que la vorticidad  $\boldsymbol{\omega}$  debe diverger allí, mientras que en el resto

del fluido  $\omega = 0$ .

#### 4.4.1. Vórtices cuánticos

Teniendo en cuenta las consideraciones hechas en la sección anterior, la presencia de vórtices no es incompatible con el carácter irrotacional del campo de velocidades asociado a un sistema cuántico, siempre que estos vórtices sean irrotacionales. Debido a esto, si consideramos un campo de velocidades como el de la ecuación 4.12, podemos calcular la fase  $S$  a partir de  $\mathbf{u} = \nabla S/m$ , obteniendo:

$$S = S_0 + m C \theta$$

De esta manera, al recorrer un contorno alrededor del vórtice, la fase habrá variado en una cantidad  $mC2\pi$ . Ahora, debido a que la función de onda  $\psi = Re^{iS}$  es univaluada, entonces  $mC$  debe ser un número entero  $n$ . Esto significa que la circulación está también cuantizada como:

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{s} = \frac{2\pi n}{m} . \quad (4.13)$$

Por este mismo motivo vemos que la fase no está definida sobre el vórtice, y por lo tanto la función de onda debe anularse sobre el mismo. En otras palabras, los vórtices irrotacionales son nodos de la función de onda.

Debido a que  $\psi$  es una función compleja, se deben cumplir dos condiciones para que se anule, la anulación de sus partes real e imaginaria, lo cual implica que si la función de onda corresponde a un sistema con  $D$  grados de libertad, el vórtice cuántico será un objeto de dimensión  $D - 2$ . Además, como hicimos notar en la sección 4.4, en un fluido irrotacional se conserva la vorticidad, es decir, si inicialmente no existen vórtices, es de esperar que al aparecer nuevos vórtices, los mismos se originen de a pares de circulación opuesta e igual intensidad. En la próxima sección veremos un ejemplo sencillo que permitirá analizar algunas de las características de los vórtices cuánticos descritas en esta sección.

#### 4.4.2. Vórtices cuánticos en el átomo de hidrógeno

El ejemplo más sencillo que se puede dar respecto de vórtices cuánticos los estados estacionarios del átomo de hidrógeno, el cual consta de un protón y un electrón que interactúan mediante un potencial coulombiano, el cual es independiente del tiempo y sólo depende de la distancia  $r$  entre electrón y protón. La ecuación de Schrödinger de este problema es:

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} ,$$



donde  $\mu$  es la masa reducida del sistema electrón-protón. En este caso, se propone para  $\psi(\mathbf{r}, t)$  una solución a variables separables de tipo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) e^{-iEt}$$

Donde la función  $\Psi(\mathbf{r})$  es una solución de la ecuación diferencial:

$$\left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = E \Psi(\mathbf{r}) , \quad (4.14)$$

y  $E$  representa la energía del estado  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ . En coordenadas esféricas, el operador  $\nabla^2$  se expresa como:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} ,$$

donde  $\theta$  y  $\phi$  son los ángulos polar y acimutal, respectivamente. La solución de la ecuación 4.14 es:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = G_{\eta\lambda}(r) e^{i\gamma\phi} P_{\lambda}^{\gamma}(\cos \theta) ,$$

donde  $G_{\eta\lambda}(r)$  es la parte radial, la cual no describiremos en detalle debido a que no es relevante para el presente desarrollo, y  $P_{\lambda}^{\gamma}(\cos \theta)$  son los *polinomios asociados de Legendre*. Los índices  $(\eta, \lambda, \gamma)$ , son denominados *números cuánticos*<sup>3</sup> y determinan la forma de estas funciones. Estos índices pueden tomar los siguientes valores:

$$\eta = 0, 1, 2, \dots$$

$$\lambda = 0, 1, 2, \dots, \eta - 1$$

$$\gamma = -\lambda, -(\lambda - 1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (\lambda - 1), \lambda .$$

Los polinomios asociados de Legendre se anulan sobre el eje  $z$  para  $\gamma \neq 0$ . Debido a que estas funciones describen un sistema con tres grados de libertad, se espera que este eje represente una línea de vorticidad, lo cual se puede confirmar calculando el campo de velocidades, el cual adopta la siguiente forma:

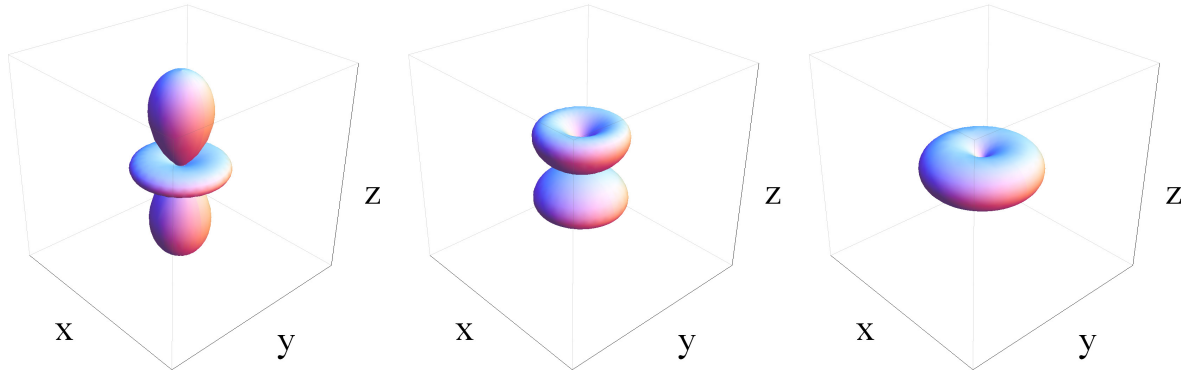
$$\mathbf{u} = \frac{\text{Im}}{\mu} \left[ \frac{\nabla \psi}{\psi} \right] = \gamma \hat{\phi} ,$$

donde  $\hat{\phi}$  es un versor unitario cuya expresión en coordenadas cartesianas es la siguiente:

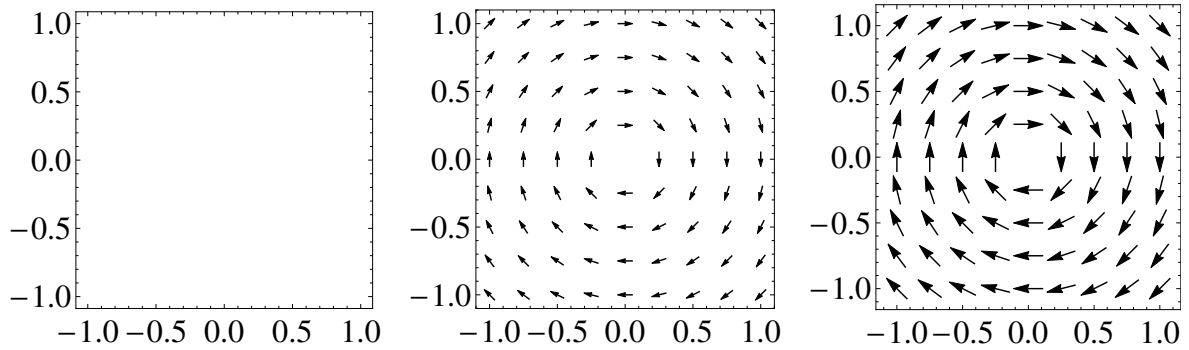
$$\hat{\phi} = -\sin \phi \hat{x} + \cos \phi \hat{y} .$$

---

<sup>3</sup>En la literatura se suele denominar a estos números como  $(n, l, m)$ , pero debido a que hemos utilizado esos índices para otras cantidades, los expresaremos de esta manera para evitar confusiones en la notación.



**Figura 4.2:** Densidad de probabilidad para  $\eta = 3$ ,  $\lambda = 2$  y  $\gamma = 0, 1, 2$ .



**Figura 4.3:** Campo de velocidades para  $\eta = 3$ ,  $\lambda = 2$  y  $\gamma = 0, 1, 2$ .

De esta manera, la circulación  $\Gamma$  del campo de velocidades para el átomo de hidrógeno es:

$$\Gamma = \frac{2\pi\gamma}{\mu}$$

En la figura 4.2, vemos la densidad de probabilidad para un estado con  $\eta = 3$ ,  $\lambda = 2$ , y tres valores distintos para el restante número cuántico:  $\gamma = 0, 1, 2$ . En la figura 4.3 se representa el campo de velocidades para estos estados. Se puede ver en estos ejemplos que para el estado con  $\gamma = 0$  la función de onda no se anula sobre el eje  $z$ , y que su campo de velocidades es nulo en todo el espacio, mientras que para los estados con  $\gamma = 1, 2$ , la función de onda se anula sobre el eje  $z$ , y por lo tanto el campo de velocidades alrededor del mismo presenta una estructura tipo vórtice cuántico. Además, el campo de velocidades para  $\gamma = 2$  tiene una intensidad del doble que para  $\gamma = 1$ , y por lo tanto su circulación será del doble también.

### 4.4.3. Vórtices cuánticos y momento angular

Podemos establecer una relación entre vorticidad y momento angular. Una partícula cuya posición es  $\mathbf{r}$  y su momento  $\mathbf{p}$ , posee un momento angular  $\mathbf{L}$ :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} .$$

En la mecánica cuántica podemos definir análogamente un operador momento angular a partir del operador momento  $\hat{\mathbf{p}}$ , como:

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} .$$

La componente  $z$  del momento angular  $L_z$  en coordenadas cilíndricas es:

$$\hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{z} ,$$

donde  $\hat{z}$  es un versor unitario en la dirección  $z$ . El valor de expectación  $L_z$  de este operador para los orbitales del átomo de hidrógeno será por tanto:

$$L_z = \gamma = \mu \frac{\Gamma}{2\pi} \tag{4.15}$$

Lo cual permite inferir cierta relación entre la circulación y la componente  $z$  del momento angular, si bien  $L_z$  está definido globalmente, y  $\Gamma$  se puede determinar de manera local. Por lo tanto, la aparición de vórtices cuánticos de pares de circulación opuesta, puede ser interpretado también como una consecuencia de la conservación de la componente  $z$  del momento angular.

## Capítulo 5

# Vórtices cuánticos en reacciones positrónicas

En este capítulo nos dispondremos a analizar la posibilidad de encontrar estructuras denominadas *vórtices cuánticos*, las cuales fueron descritas en el capítulo 4, en base a la mecánica Bohmiana, allí desarrollada. Esto nos permitirá interpretar de manera más profunda los resultados obtenidos en el capítulo 3, en donde se encontró un mínimo muy pronunciado en la sección eficaz, para el cual no se pudo encontrar una explicación sencilla.

Si bien la presencia de vórtices cuánticos en secciones eficaces de colisión ha sido probada y estudiada [15, 16, 52–55], la misma no fue desarrollada para reacciones positrónicas, lo cual constituye un gran estímulo para investigar esta posibilidad.

Debido a que la teoría que vimos en el capítulo 4, fue desarrollada para la función de ondas, mientras que en el campo de las colisiones atómicas nos interesa el cálculo de secciones eficaces, establecemos primero la relación entre ambas, lo cual es posible gracias a un teorema que determina el comportamiento asintótico de la función de ondas a tiempos grandes [52, 55, 56].

Luego, por medio del estudio sistemático del elemento de matriz de transición  $t_{if}$  (ver capítulo 3) para la ionización positrón-hidrógeno atómico ( $H$ ) en una geometría colineal, descubrimos la presencia de tres ceros aislados a energías de impacto intermedias <sup>1</sup>. Demostramos que esos ceros representan de hecho vórtices en el campo de velocidades asociado a  $t_{if}$  (ver ecuaciones 3.2 y 5.8). Uno de estos vórtices muestra estar relacionado a un profundo mínimo observado por Brauner y Briggs en 1991 [41] a energías de impacto extremadamente altas, donde la sección eficaz diferencial completa (*FDCS*) correspondiente era demasiado pequeña para ser experimentalmente accesible. Aquí elucidamos que éste puede estar aún presente a energías de impacto

---

<sup>1</sup>En colisiones positrón-blanco, se consideran bajas energías a energías de algunos pocos múltiplos de la primera energía de ionización del blanco, y altas energías a energías del orden de los kiloelectronvoltios.

mucho más bajas, siendo por lo tanto factible de ser investigado experimentalmente. Además, descubrimos que este vórtice está emparentado con uno de circulación opuesta, en acuerdo con uno de los escenarios para su emergencia. Estudiamos la ubicación de estos vórtices y encontramos que estos parecen estar localizados en, emerger de, o moverse hacia puntos específicos, que en el límite de altas energías <sup>2</sup> coinciden con mecanismos clásicos, algunos de los cuales fueron descritos en los capítulos 1 y 2. Finalmente, pudimos observar la estructura de los vórtices cuánticos cuando relajamos la condición de colinealidad.

## 5.1. Teorema Imagen

Tanto la mecánica bohmiana, como la formulación de Copenhague de la mecánica cuántica, parten de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ecuación 4.1), cuyo dominio es el espacio de configuraciones y el tiempo. Sin embargo, debido a que en los problemas de colisiones atómicas uno está interesado en calcular secciones eficaces, uno debe establecer un nexo entre la función de ondas y la distribución de momentos de las partículas en el límite de tiempos grandes ( $t \rightarrow \infty$ ).

Para obtener esta relación, la cual fue desarrollada por Macek [52, 55] y Dollard [56], se considera que luego de la colisión, una partícula dispersada por un potencial tenderá a moverse asintóticamente en una trayectoria rectilínea. Es decir:

$$\mathbf{r} \approx \mathbf{k}t/m, \quad (5.1)$$

donde  $\mathbf{r}$  es la posición de la partícula dispersada por un centro de fuerzas,  $m$  es su masa y  $\mathbf{k}$  su momento. En ambos planteos, se considera que la evolución a tiempos grandes será similar a la de un paquete de ondas libre.

En un problema de ionización completa, se puede estimar que las partículas han evolucionado al continuo a partir de estados ligados (como por ejemplo el electrón y el protón en el caso que estamos tratando), o de una zona de interacción de dimensiones atómicas (como por ejemplo el positrón que interactúa con el núcleo). La evolución en el espacio de coordenadas de un paquete de ondas que proviene de una distribución tipo *Delta de Dirac* a  $t = 0$ , tendrá la siguiente expresión:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} e^{i\frac{m\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}}{2t}}. \quad (5.2)$$

Nos basaremos en esta ecuación como modelo para la evolución de la función de ondas, tal como fuera adoptado en el trabajo de Macek [52, 55]. De esta manera, se

---

<sup>2</sup>También conocido como *límite clásico* en la teoría de colisiones atómicas, ya que para lo que se consideran altas energías en esta rama de la física, se espera que las partículas se comporten clásicamente.

puede proponer una función del tipo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} e^{i\frac{m\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}}{2t}} f(\mathbf{r}, t) , \quad (5.3)$$

donde  $f$  es una función de ondas reducida que representa el estado del sistema sobre la frontera a partir de la cual comienza la evolución libre, la cual está multiplicada por la función de ondas de un paquete que a tiempo  $t = 0$  se encuentra concentrado en el origen. Su transformada de Fourier será:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\left(\frac{m\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}}{2t} - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)} f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (5.4)$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi it}\right)^{3/2} e^{-i\frac{k^2 t}{m}} \int e^{i\frac{im}{2t}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{k}t}{m}\right)^2} f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} . \quad (5.5)$$

En el límite de tiempos grandes se espera que se cumpla asintóticamente la condición 5.1, por lo tanto la fase en el integrando de la última ecuación será fuertemente oscilante. De esta manera, podemos extraer la función  $f$  de la integral en 5.5, ya que si consideramos un desarrollo de Taylor de la misma centrado en  $\mathbf{r} = \mathbf{k}t$ , el producto con una función altamente oscilante hará que sólo persista el orden más bajo  $f(\mathbf{k}t, t)$  al integrar en todo el espacio, obteniéndose:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = \left(\frac{m}{2\pi it}\right)^{3/2} e^{-i\frac{k^2 t}{m}} f(\mathbf{k}t, t) \int e^{i\frac{im}{2t}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{k}t}{m}\right)^2} d\mathbf{r} .$$

El valor de esta última integral se puede calcular de manera exacta:

$$\int e^{i\frac{im}{2t}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{k}t}{m}\right)^2} d\mathbf{r} = \left(\frac{2\pi it}{m}\right)^{3/2} ,$$

con lo cual la ecuación 5.5, queda:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = e^{-i\frac{k^2 t}{m}} f(\mathbf{k}t, t) \quad (5.6)$$

$$= \left(\frac{it}{m}\right)^{3/2} e^{-i\frac{k^2 t}{m}} \psi(\mathbf{k}t, t) . \quad (5.7)$$

De esta manera podemos encontrar una ecuación para el elemento de matriz  $t_{if}$  (ver ecuación 3.2), como:

$$|t_{if}(\mathbf{k})|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{t}{m}\right)^3 |\psi(\mathbf{k}t, t)|^2 ,$$

resultado que en el caso de tres partículas que estamos tratando se extiende como:

$$|t_{if}(\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbf{K}_R)|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{t}{M_T}\right)^3 |\psi(\mathbf{k}t, \mathbf{K}t, \mathbf{K}_R t, t)|^2 . \quad (5.8)$$

## 5.2. Vórtices cuánticos en secciones eficaces

A partir de la equivalencia establecida por 5.8, se puede definir un campo de velocidades generalizado  $\mathbf{u}$ , al igual que hicimos para la función de ondas, el cual proviene de la formulación bohmiana de la mecánica cuántica desarrollada en el capítulo 4, como [17] :

$$\mathbf{u} = \text{Im} \left[ \frac{\nabla_{\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbf{K}_R} t_{if}}{t_{if}} \right]. \quad (5.9)$$

De esta manera, teniendo en cuenta la relación entre el elemento de matriz y la sección eficaz dada por la ecuación 3.2, se puede postular la presencia de vórtices cuánticos en secciones eficaces de colisión [17, 18, 52, 55, 57, 58], y extender el estudio de los mismos hecho previamente para su aparición en la función de ondas [59, 60].

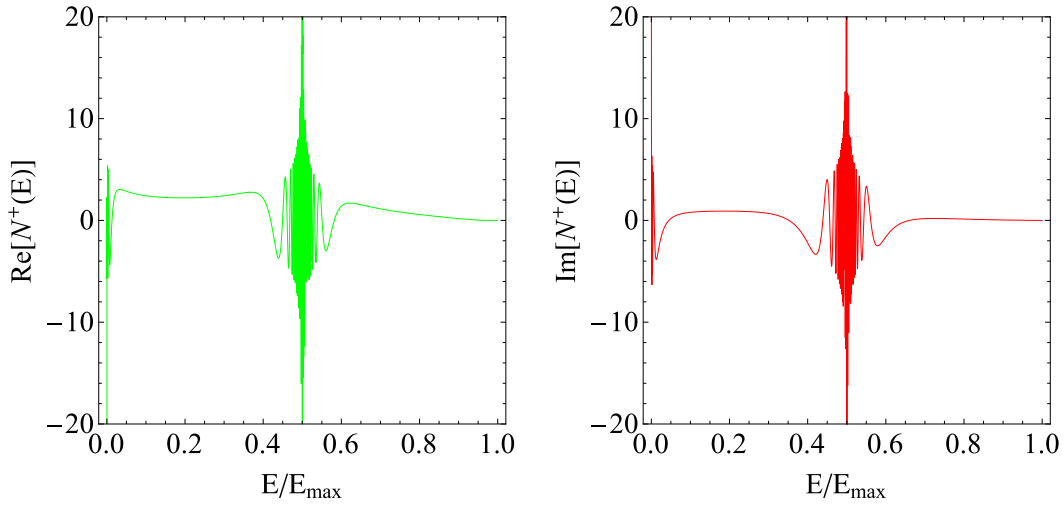
Para determinar de manera concluyente que un mínimo es efectivamente un cero, para una función compleja, tanto sus partes real como imaginaria se deben anular. Esto establece dos condiciones que debe cumplir el elemento de matriz en los vórtices, por lo tanto la región del espacio de momentos donde aparecerán será de una dimensión dos veces menor a la del espacio de momentos que se está analizando. En nuestro caso, como estamos analizando la condición de colinealidad (sección 1.8), el elemento de matriz depende de dos variables, los momentos paralelo y perpendicular del electrón. Por lo tanto se espera que en este espacio, un vórtice aparezca como un punto. Una forma de corroborar que estamos en presencia de un cero de manera precisa, es trazando las curvas donde se anulan las partes real e imaginaria del elemento de matriz, y luego encontrar los puntos donde ambas se cruzan, donde estarán localizados el o los vórtices.

A partir de la ecuación 3.17, en donde expresamos el elemento de matriz como el producto de un elemento de matriz reducido y el producto de tres factores de Coulomb (ver ecuación 3.8) que denominamos  $N_{tot}^+$  (ver ecuación 3.16), podemos encontrar sus partes real e imaginaria, como:

$$\begin{aligned} \text{Re}[t_{if}] &= \text{Re} [\tilde{t}_{if} N_{tot}^+] \\ &= \text{Re} [\tilde{t}_{if}] \text{Re} [N_{tot}^+] - \text{Im} [\tilde{t}_{if}] \text{Im} [N_{tot}^+] \\ \text{Im}[t_{if}] &= \text{Im} [\tilde{t}_{if} N_{tot}^+] \\ &= \text{Re} [\tilde{t}_{if}] \text{Im} [N_{tot}^+] + \text{Im} [\tilde{t}_{if}] \text{Re} [N_{tot}^+] . \end{aligned}$$

En la figura 5.1, se grafican las partes real e imaginaria de los factores de Coulomb<sup>3</sup>, y se puede ver su comportamiento altamente oscilante, sobre todo para  $E/E_{max} \approx 0$  y  $E/E_{max} \approx 0.5$ , lo cual complica la graficación de los ceros de las partes real e imaginaria del elemento de matriz. Sin embargo, debido a que  $|N_{tot}|$  no posee ceros aislados como

<sup>3</sup>Estos factores se grafican para un ángulo  $\theta = 0$  porque su dependencia con el ángulo es pequeña, por lo tanto los cortes a cualquier otro ángulo serán similares.



**Figura 5.1:** Partes real(verde, izquierda) e imaginaria(rojo,derecha) del factor de Coulomb en función de la energía del electrón para ángulo  $\theta = 0$ .

se ve en la figura 5.2, un cero del elemento de matriz reducido será un cero del elemento de matriz, y bastará con encontrar los ceros del elemento de matriz reducido.

El campo de velocidades se descompone entonces en:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &= \text{Im} \left[ \frac{\nabla t_{if}}{t_{if}} \right] \\
 &= \text{Im} \left[ \frac{\nabla (N_{tot} \tilde{t}_{if})}{N_{tot} \tilde{t}_{if}} \right] \\
 &= \text{Im} \left[ \frac{\nabla N_{tot}}{N_{tot}} \right] + \text{Im} \left[ \frac{\nabla \tilde{t}_{if}}{\tilde{t}_{if}} \right] .
 \end{aligned}$$

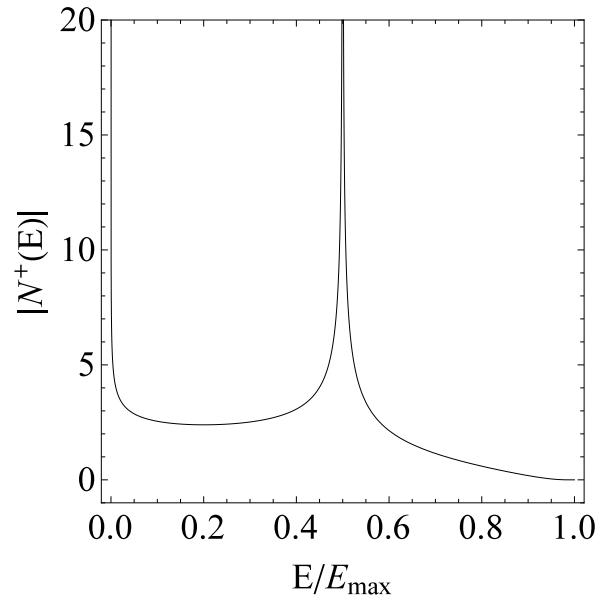
Donde el primer término corresponde a un campo de velocidades radial, y el segundo será el que presentará flujos vórtices, el cual denominaremos  $\tilde{\mathbf{u}}$ , definido como:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \text{Im} \left[ \frac{\nabla \tilde{t}_{if}}{\tilde{t}_{if}} \right] .$$

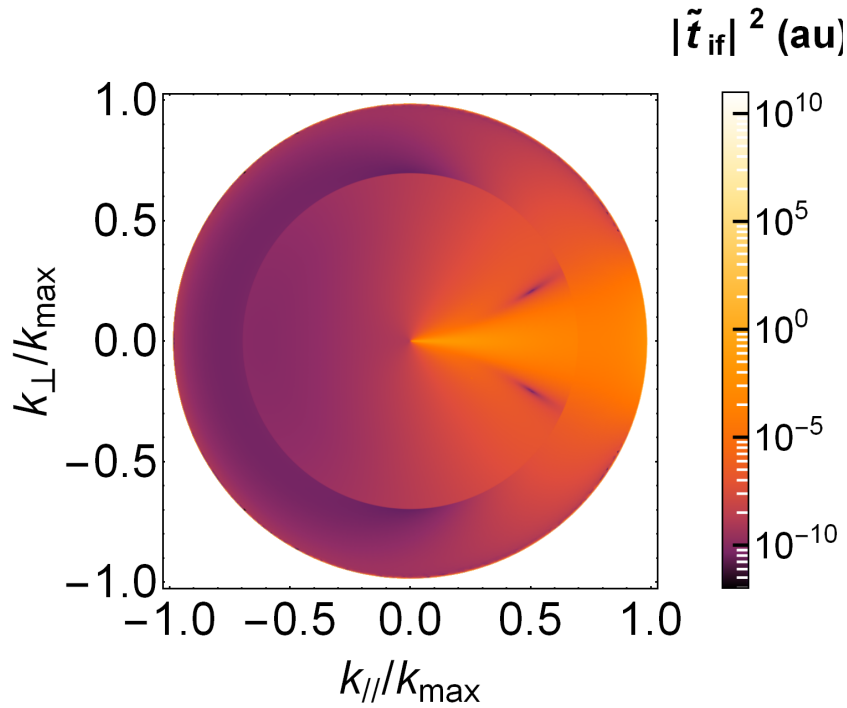
Para investigar la presencia de vórtices cuánticos representaremos el elemento de matriz reducido  $\tilde{t}_{if}$  en espacio de momentos<sup>4</sup>, como se observa en la figura 5.3. Luego en la figura 5.4, representamos las curvas correspondientes a los ceros de las partes real e imaginaria de  $\tilde{t}_{if}$ . Podemos ver que en la posición del mínimo de la figura 5.3 se observa un cruce entre ambas curvas, por lo tanto podemos afirmar que estamos en presencia de un cero. A su vez, en la figura 5.5 graficamos el campo de velocidades alrededor del cero, el cual muestra las características del correspondiente a un flujo

<sup>4</sup>Hacemos esta representación en espacio de momentos, ya que este tipo de representación es más clara en coordenadas cartesianas que en polares.

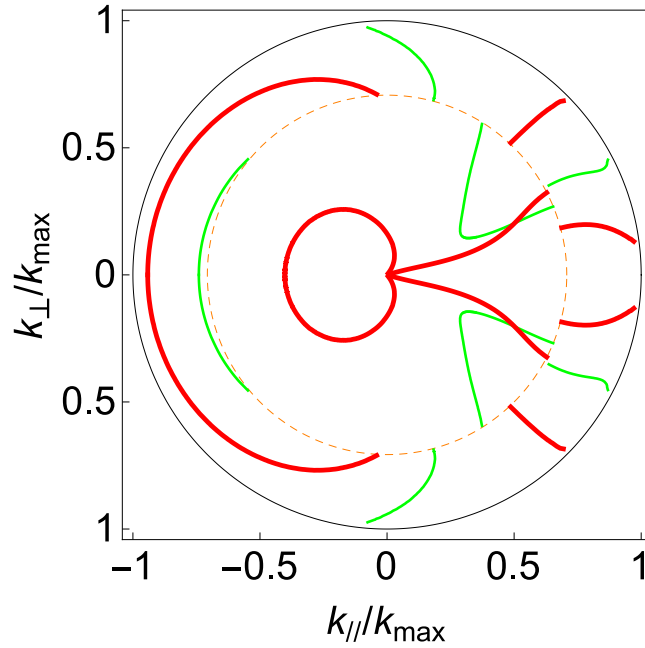




**Figura 5.2:** Módulo del factor de Coulomb en función de la energía del electrón para ángulo  $\theta = 0$ .



**Figura 5.3:** Módulo cuadrado de la amplitud del elemento de matriz reducido  $|\tilde{t}_{if}|^2$  para la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un positrón de 100 eV. Las condiciones están fijadas en una configuración de geometría colineal discutida más arriba.  $k_{||}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}_e$  paralela y perpendicular a la velocidad del positrón, respectivamente.



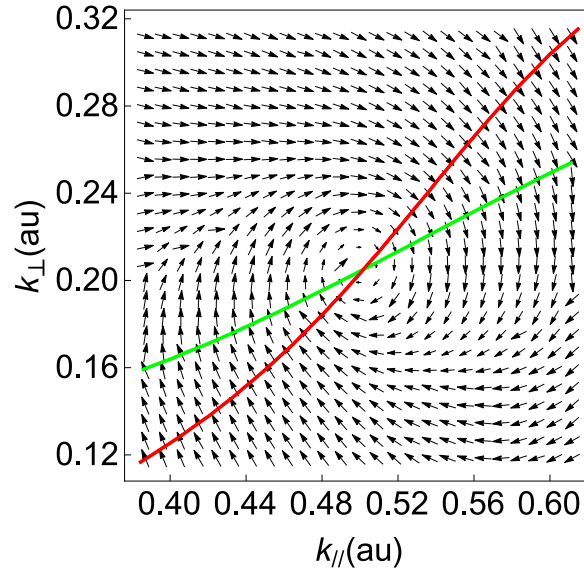
**Figura 5.4:** Líneas correspondientes a los ceros de las partes real e imaginaria del elemento de matriz reducido  $\hat{t}_{if}$  (ver texto) en una geometría colineal para la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un positrón de 100 eV.  $k_{||}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}_e$ , paralela y perpendicular a la velocidad inicial del positrón, respectivamente.

vórtice. Se calculó la circulación correspondiente a este campo de velocidades (ver ecuación 4.13), cuyo valor dio  $\Gamma = 2\pi$ , lo cual termina de confirmar la presencia del vórtice y su intensidad. Una característica destacable de la figura 5.5 es que el campo de velocidades es perpendicular en los cruces con las curvas correspondientes a los ceros de las partes real e imaginaria. La explicación de este fenómeno [17] se debe a que, de manera general, si analizamos el campo de velocidades  $\mathbf{u}_f$  de una función compleja  $f = \text{Re}[f] + i\text{Im}[f]$ :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_f &= \text{Im} \left[ \frac{\nabla f}{f} \right] \\
 &= \text{Im} \left[ \frac{f^* \nabla f}{f^* f} \right] \\
 &= \text{Im} \left[ \frac{\text{Re}[f] \nabla \text{Re}[f] - \text{Im}[f] \nabla \text{Im}[f] + i(\text{Re}[f] \nabla \text{Im}[f] + \text{Im}[f] \nabla \text{Re}[f])}{|f|^2} \right] \\
 &= \frac{\text{Re}[f] \nabla \text{Im}[f] + \text{Im}[f] \nabla \text{Re}[f]}{|f|^2},
 \end{aligned}$$

donde  $f^*$  es el complejo conjugado y  $|f|^2$  es el módulo cuadrado de la función. Vemos que para la curva de nivel  $\text{Re}[f] = 0$ :

$$\mathbf{u}_f = \frac{\text{Im}[f]}{|f|^2} \nabla \text{Re}[f],$$



**Figura 5.5:** Campo de velocidades generalizado del elemento reducido de matriz  $\tilde{t}_{if}$  (ver texto) en una geometría colineal para la ionización de hidrógeno atómico por impacto de un positrón de 100 eV.

por lo tanto, el campo de velocidades apunta en la dirección del gradiente de  $\text{Re}[f]$  el cual es perpendicular a las curvas de nivel. Un análisis similar se puede hacer para  $\text{Im}[f] = 0$ . De manera que podemos afirmar que  $\mathbf{u}_f$  será perpendicular a las curvas correspondientes a los ceros de la función. Esto se cumplirá entonces tanto para la función de ondas, el elemento de matriz o el elemento de matriz reducido.

### 5.3. Vórtices cuánticos y su dependencia con la energía de impacto

En 1991, Brauner y Briggs [41] descubrieron teóricamente un mínimo profundo de alrededor de tres órdenes de magnitud en la *FDCS* para la ionización de hidrógeno atómico por impacto de positrones. Ya que éste aparecía cuando los ángulos de dispersión del electrón y el positrón estaban cerca del valor crítico de  $45^\circ$  respecto de la dirección de incidencia del positrón, ellos lo atribuyeron a la interferencia entre dos procesos binarios de dispersión, de manera similar al mecanismo propuesto por Thomas en 1927 [61], desarrollado en la sección 2.3.2. Este efecto fue estudiado únicamente a energías de impacto muy altas, entre 10 y 100 *keV*, a las cuales, tal como estos mismos autores resaltaron, la *FDCS* es demasiado pequeña como para ser medida, ya que las secciones eficaces aumentan al disminuir la energía de impacto del proyectil (ver por ejemplo la ecuación 3.2). Esta limitación puede haber desalentado cualquier intento de medir este efecto a pesar de su interés y rareza. De hecho, este mínimo profundo no ha sido experimentalmente observado o incluso buscado desde su descubrimiento teórico.

Debido a nuestro hallazgo de un vórtice cuántico en secciones eficaces de colisión positrón- $H$  a una energía de incidencia del positrón de  $100\text{ eV}$ , en esta sección exploramos la posibilidad de que el mínimo descubierto por Brauner y Briggs [41] a energías tan altas fuera de hecho un vórtice, y la factibilidad de su presencia a energías más bajas, lo cual facilitaría su observación experimental. Finalmente hicimos un estudio sistemático para un rango que va desde bajas hasta altas energías de impacto del positrón.

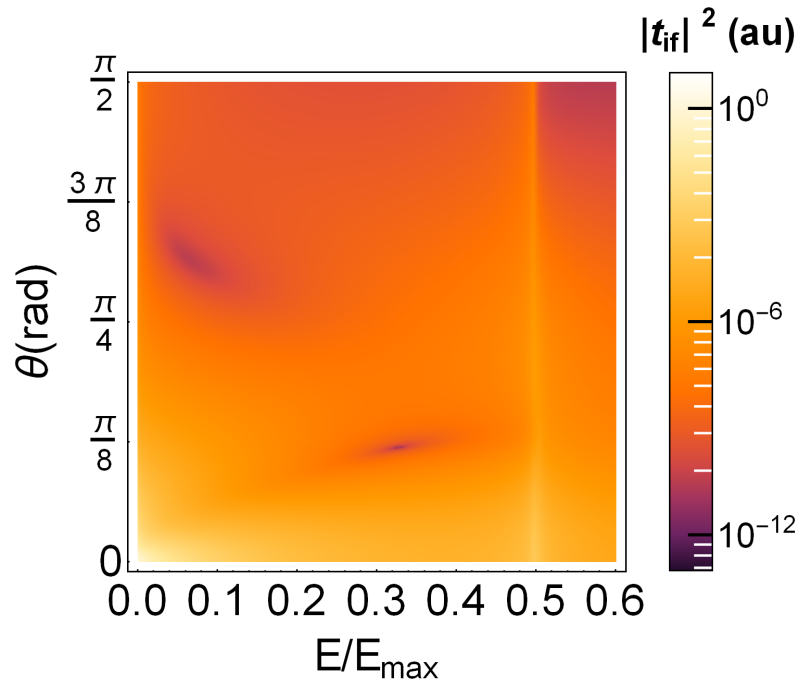
### 5.3.1. Aparición de pares de vórtices de circulación opuesta

En su trabajo de 1991, Brauner y Briggs calcularon la presencia de un mínimo a energías de incidencia del positrón de  $10$  y  $100\text{ keV}$ , y pudieron comprobar que para una energía de  $250\text{ eV}$  este mínimo desaparece. Debido a que el mínimo a  $10$  y  $100\text{ keV}$  se encontraba a un ángulo de  $45^\circ = \pi/4$ , respecto de la dirección de incidencia del positrón, repitieron este cálculo al mismo ángulo, pero para una energía de  $250\text{ eV}$ . Sin embargo, en todo el rango de energías entre  $250\text{ eV}$  y  $10\text{ keV}$ , no realizaron ningún cálculo que permitiera establecer a qué energía se originaba este mínimo.

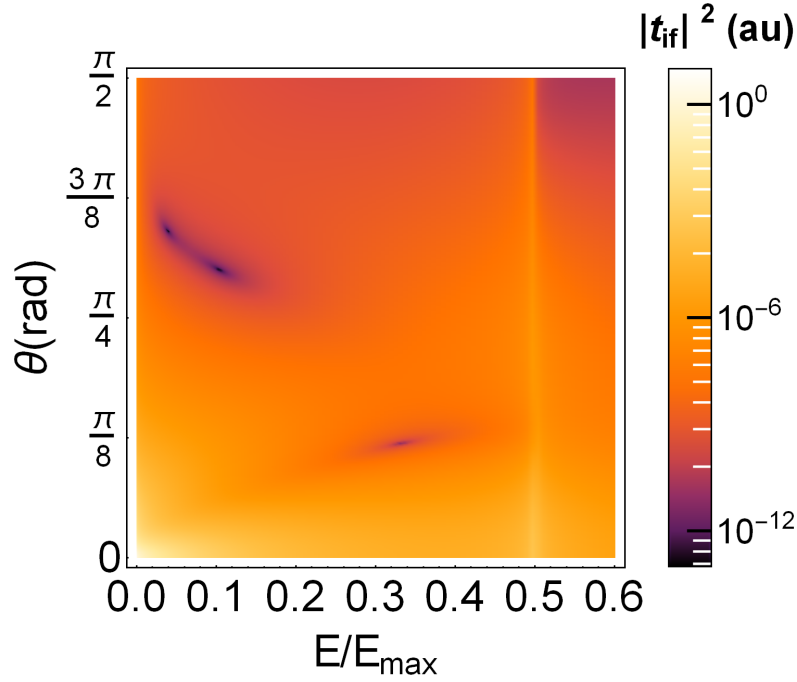
En la figura 5.6 mostramos<sup>5</sup> el módulo cuadrado del elemento de matriz de transición  $|t_{if}|^2$ , a una energía de impacto de  $250\text{ eV}$ , la mínima energía analizada por Brauner y Briggs en 1991 [41]. Se puede notar en esta figura la presencia de un mínimo a un ángulo de escape del electrón  $\theta \approx 0.4$ , y energía  $E/E_{max} \approx 0.3$ , es decir, en una región del espacio de momentos similar a la cual se encontró el vórtice calculado a  $100\text{ eV}$  que se muestra en la figura 3.1. Podemos observar además la presencia de estructuras que fueron descritas en el capítulo 5, como el pico  $ECC$  [6, 62, 63], y el pico  $SE$ . No se ha graficado hasta la energía máxima, por lo tanto no se observa el límite cinemático. Además del vórtice antes mencionado, se puede observar un mínimo para un ángulo  $\theta \approx \pi/3 = 60^\circ$ , mientras que a un ángulo  $\theta = \pi/4 = 45^\circ$  no se observa ningún mínimo, tal cual fue calculado por Brauner y Briggs. El mínimo a  $\theta \approx \pi/3 = 60^\circ$  es un indicio de algún tipo de fenómeno físico produciéndose en esa región del espacio de momentos del electrón, por lo cual, se realizaron cálculos sistemáticamente en intervalos de  $5\text{ eV}$  desde  $230$  hasta  $300\text{ eV}$ . A partir del análisis de las gráficas se pudo determinar que cuando se incrementa la energía de impacto del positrón por encima de  $265\text{ eV}$ , este mínimo da origen a dos vórtices, como se muestra en las figura 5.7.

En la figura 5.8, se superpone el campo de velocidades  $\mathbf{u}$  (ver ecuación 5.9) al módulo cuadrado de  $t_{if}$ . Hacemos esta representación en espacio de momentos, ya que este

<sup>5</sup>De aquí en adelante graficaremos sólo el elemento de matriz  $t_{if}$ , lo cual estimamos que aporta mayor claridad que graficar el elemento de matriz reducido  $\hat{t}_{if}$ , ya que el primero es el que se suele mostrar en la literatura, y con el cual el lector puede estar más familiarizado. Además, si bien el procedimiento para hallar la localización de los vórtices cuánticos de manera más precisa consiste en determinar los cruces de las líneas correspondientes a los ceros de las partes real e imaginaria de  $\hat{t}_{if}$ , el cual de hecho es el que se emplea, continuar graficando estas líneas no aporta información adicional al presente estudio, por lo cual ya no se graficarán.



**Figura 5.6:** Módulo cuadrado del elemento de matriz de transición,  $|t_{if}|^2$ , para la ionización de hidrógeno atómico por impacto de positrones a una energía de 250 eV. El sistema es analizado en una configuración geométrica colineal.  $E$  y  $\theta$  son la energía y el ángulo de emisión del electrón (con respecto a la dirección de la velocidad inicial del positrón), respectivamente. La energía está normalizada por la energía máxima que puede alcanzar el electrón  $E_{max}$ .

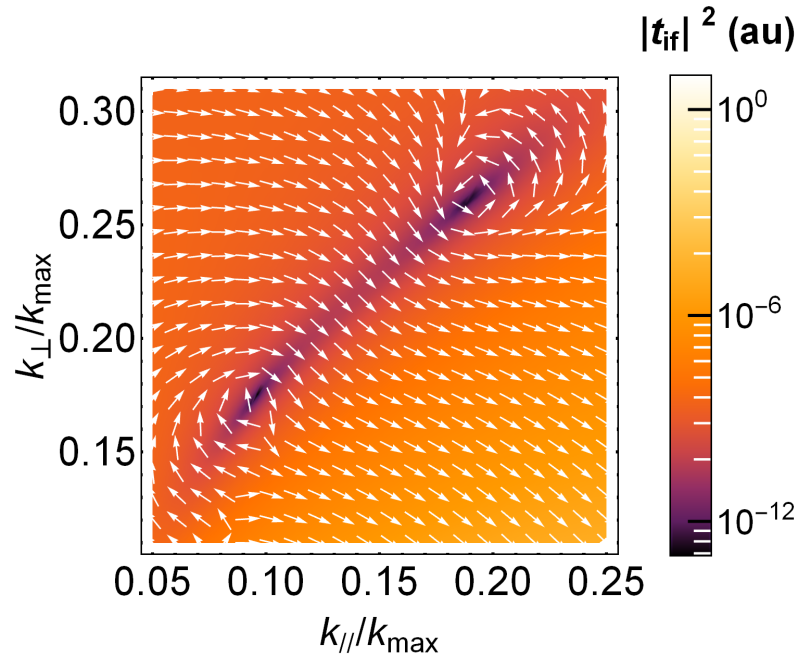


**Figura 5.7:** Como la figura 5.6 pero para  $E = 275$  eV.

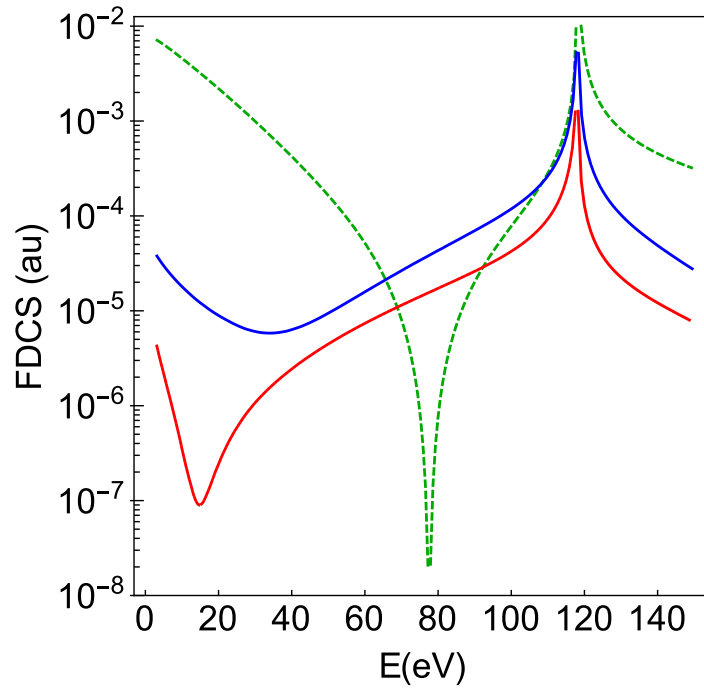
tipo de representación es más clara en coordenadas cartesianas que en polares. Vemos claramente que el campo de velocidades alrededor de los ceros de  $t_{if}$  corresponde al de vórtices cuánticos [57], tal como describimos en la sección 4.4.1. Al evaluar la circulación alrededor de cada vórtice confirmamos que ambos están cuantizados en  $2\pi$ , y que la misma tiene signo opuesto entre ambos, lo cual es consecuencia de la univaluación de la función de ondas, tal como fue analizado en la sección 4.4.1. Estos dos vórtices aparecen (y de hecho se desdoblan) a una energía mayor a  $E \approx 265$  eV (y se fusionan a energías menores a ésta), la cual es suficientemente pequeña como para que la sección eficaz sea medible. Es notable cuán cerca estuvieron Brauner y Briggs (1991) [41] de observar la aparición de este par de vórtices, de tan sólo incrementar el ángulo al cual realizaron sus cálculos a  $\theta \approx \pi/3$ , como se muestra en la figura 5.9. Además, el cero a  $\theta \approx \pi/8$  era ya observable a esta energía de impacto.

De la misma manera en la cual se expresó en la sección 4.4.1, un vórtice es un objeto de dimensión dos veces menor al espacio en el cual se manifiesta en el elemento de matriz. El elemento de matriz del experimento de colisión de tres partículas que estamos analizando pertenece a un espacio tetradimensional<sup>6</sup>. Cuando uno elige una geometría particular, como la colineal empleada en este trabajo, se imponen restric-

<sup>6</sup>Por lo cual resultaría imposible realizar una gráfica completa del mismo, ya que sería necesario hacer una representación en un espacio de cinco dimensiones.



**Figura 5.8:** Representación detallada del módulo cuadrado del elemento de matriz de transición,  $|t_{if}|^2$ , de la colisión de ionización positrón  $H$  a una energía de  $275 \text{ eV}$  en proximidad al par de ceros mostrados en la figura 5.7. Los ejes representan las componentes del momento del electrón paralela ( $k_{||}$ ) y perpendicular ( $k_{\perp}$ ) a la velocidad inicial del positrón, respectivamente. Las mismas están nomalizadas al momento máximo  $k_{\max} = \sqrt{2E_{\max}}$  permitido por conservación de la energía. Las direcciones del campo de velocidades generalizado  $\mathbf{u}$  se muestran superpuestos sobre  $|t_{if}|^2$ , como vectores unitarios blancos.



**Figura 5.9:** Sección eficaz diferencial completamente diferencial (*FDCS*) para la colisión de ionización positrón-*H* a una energía de impacto del positrón de 250 eV, como función de la energía del electrón  $E$  para valores fijos del ángulo de emisión  $\theta = \pi/8$  (curva punteada roja),  $\pi/4$  (curva continua azul) y  $\pi/3$  (línea de trazos verde), en la condición de colinealidad. La curva para  $\theta = \pi/4$  coincide exactamente con los resultados de la figura 2 del trabajo de Brauner y Briggs (1991) [41]. En este gráfico no hemos realizado una normalización por la energía máxima  $E_{max}$ , ya que tratamos de representar los resultados del modo en que lo hicieron Brauner y Briggs (1991) en su trabajo, para una comparación más sencilla.



ciones al problema, lo cual equivale a practicar un corte al vórtice, el cual en nuestro caso es un objeto bidimensional (o sea, una superficie en un espacio tetradimensional). Debido a que la condición de colinealidad reduce en dos la cantidad de variables del problema, la presencia de un vórtice debería de revelarse como un punto aislado. Pero también podría ocurrir que el vórtice se manifestara en el problema al tener en cuenta la dimensionalidad completa del mismo, pero que al establecer la condición de colinealidad, el corte que realizáramos no lo intersecara, y el mismo por tanto no se 'revelara'. Ésta es probablemente la razón por la cuál los vórtices no son observados a una energía de 250 eV. Cuando se incrementa la energía, los vórtices se deforman e intersecan la región del espacio de configuraciones observada mediante la geometría colineal. En este sentido, la aparición de vórtices a una energía de impacto particular es fortuita, y depende solamente de la elección arbitraria de una geometría particular.

En este punto, aún continúa abierto el interrogante acerca de si alguno de estos dos vórtices encontrados a 275 eV está relacionado al mínimo pronunciado observado a  $E = 10$  y  $100$  keV por Brauner y Briggs en 1991 [41], y si el vórtice a 100 eV encontrado por nosotros [17] está relacionado con aquellos encontrados a 250 y 275 eV. Con el fin de resolver estos interrogantes, realizamos un análisis sistemático de su localización precisa para energías de impacto de 60 hasta 3000 eV. Y si bien la máxima energía que calculamos es menor a 10 keV, veremos que da resultados concluyentes en dirección de cumplir nuestro objetivo.

### 5.3.2. Evolución de los vórtices cuánticos con la energía de impacto

La imagen estroboscópica llevada a cabo en la figura 5.10 fue elaborada colocando puntos de igual opacidad en cada posición del espacio  $E$  vs.  $\theta$  en que se encontraba un vórtice cuántico a medida que se incrementaba la energía desde 60 eV en intervalos de 10 eV, hasta alcanzar una energía de 3000 eV (3 keV). Por lo tanto, las zonas en las cuales las curvas que se forman se ven más oscuras indican que los vórtices no varían demasiado su posición al aumentar la energía de impacto del proyectil, permitiendo ver las asíntotas a las cuales se aproximan.

En la gráfica estroboscópica de la figura 5.10, y su figura complementaria 5.11, se puede ver que uno de los vórtices que se origina a 265 eV (marcado en azul en la figura) converge en el eje de energía hacia el pico *ECC*, y al ángulo crítico  $\theta = \pi/4 = 45^\circ$  para energías altas, lo cual coincide con los valores predichos por el mecanismo de colisión clásico denominado mecanismo de Thomas, que vimos en la sección 2.3.2. A su vez, el compañero de circulación opuesta de este vórtice (en naranja), se aproxima hacia  $E/E_{max} \approx 0$ , y un ángulo  $\theta \approx 1.37 \approx 78.5^\circ$ , si bien para  $E$  estrictamente igual a cero el ángulo  $\theta$  es indeterminado. También podemos observar el origen y evolución

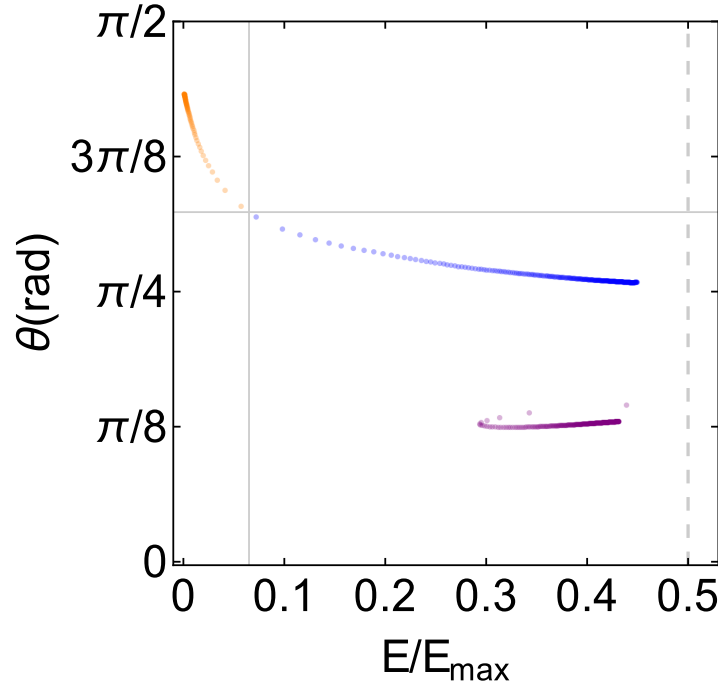
del vórtice descrito en el capítulo 5 (en violeta), el cual parece emerger a una energía de impacto de 60 eV cerca del pico *ECC* en espacio de momentos. La gráfica de su evolución nos permite ver que el vórtice a 250 y 275 eV a  $\theta \approx \pi/8$  se corresponden con éste, y que de hecho su ángulo se mantiene muy cerca de este valor durante toda su evolución. Si bien este ángulo coincide con el mecanismo de *electrones de ensilladura* descrito en la sección 3.3.2, la energía a la cual se encuentra nunca se adquiere el valor  $E/E_{max} = 0.2$  predicho por éste. El lector atento observará que este vórtice parece emerger sin un compañero de circulación opuesta. A pesar de que al realizar cálculos a tan bajas energías estamos forzando el rango de validez del modelo *CDW*<sup>7</sup> descrito en el capítulo 3, lo cual podría enmascarar la presencia de un compañero para este vórtice, trataremos de todas maneras de esclarecer un poco más la naturaleza del mismo en la sección 5.4.

A pesar de realizar un estudio sistemático de la localización de vórtices cuánticos en el elemento de matriz  $t_{if}$  hasta una energía de impacto de 3 keV, también se realizó un cálculo a una energía de 10 keV, que se ve en la figura 5.12 (el vórtice que se aproxima a  $E/E_{max} = 0$  no es notorio en esta figura), que fue la energía para la cual encontraron Brauner y Briggs (1991) un vórtice cuántico a  $E/E_{max} = 0.5$ ,  $\theta = \pi/4$  e identificaron de manera correcta, pero no completa, como un mínimo. Allí se observa cómo los vórtices marcados en violeta y azul en la figura 5.11, han concluido prácticamente su convergencia en energía hacia el pico *ECC*. Como ya mencionamos, a estas energías la magnitud de la *FDCS* sería demasiado pequeña para ser medida. Sin embargo, el vórtice a  $\theta \approx \pi/8$  emerge de una zona muy cercana al pico *ECC* (al cual vuelve a converger a energías altas), pudiendo generar una distorsión en el mismo, la cual podría ser medida por espectroscopía electrónica estándar [58]. Esto representaría una oportunidad única en pos de realizar la primera observación experimental de un vórtice en colisiones de ionización positrón-átomo.

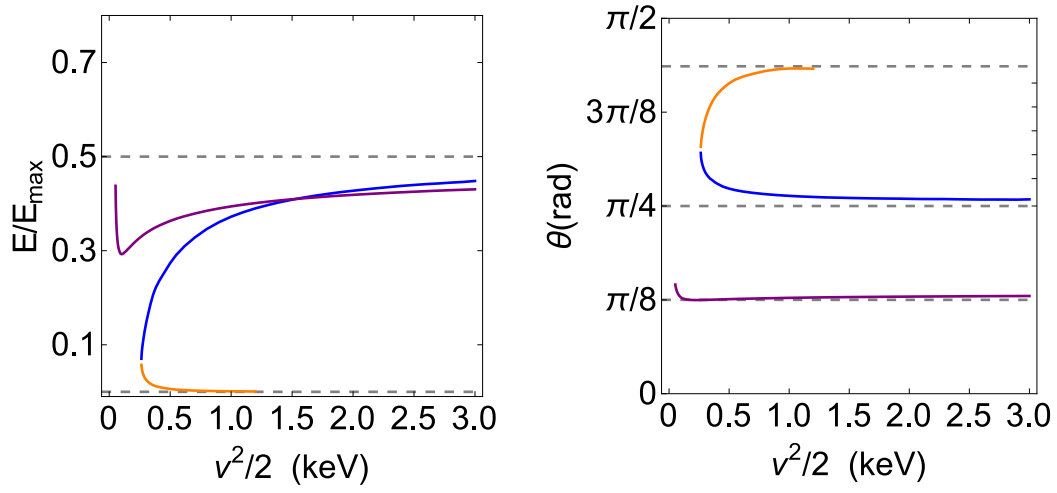
## 5.4. Morfología de los vórtices cuánticos

Si liberamos otro grado de libertad en nuestro problema, podremos apreciar de manera más completa la estructura de los vórtices cuánticos. De este modo, actualmente al realizar nuestro estudio en la geometría colineal, nos alcanzó con expresar nuestros resultados en función de los momentos paralelo y perpendicular del electrón, y como consecuencia los vórtices se presentaron en este espacio como puntos aislados. El nuevo grado de libertad que introduciremos será el ángulo polar entre electrón y positrón ( $\Theta - \theta$ ), pero manteniéndose aún ambos sobre el mismo plano, de modo que ahora los vórtices se manifestarán como curvas en un espacio tridimensional.

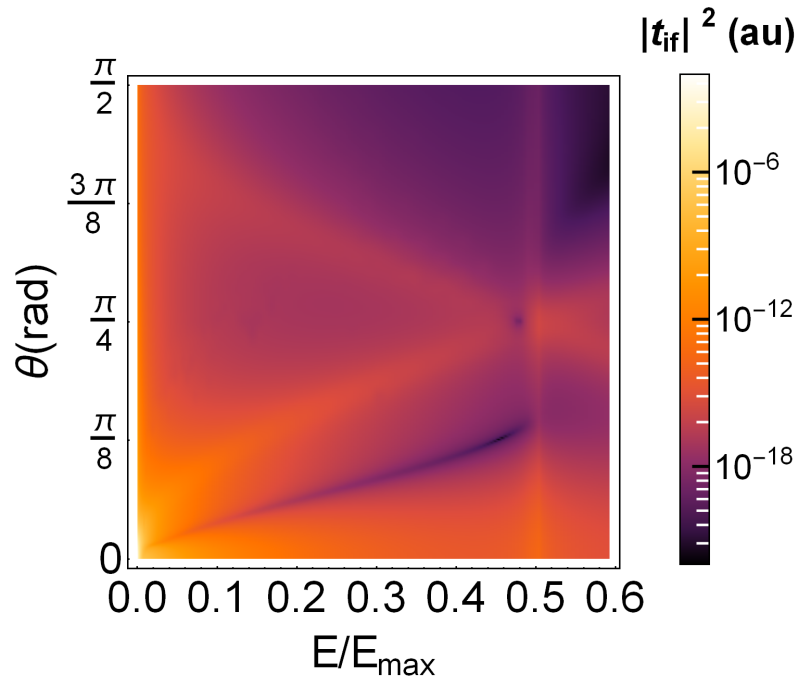
<sup>7</sup>Recordar que éste es un modelo perturbativo, por lo tanto su descripción es más precisa a medida que aumentamos la energía de impacto del proyectil.



**Figura 5.10:** Gráfica estroboscópica de la localización de vórtices en el elemento de matriz  $t_{if}$  para la ionización de un átomo de hidrógeno por impacto de un positrón de energía  $v^2/2$  en geometría colineal. Tal como en la figura 5.6,  $E$  y  $\theta$  son la energía del electrón y su ángulo de emisión, respectivamente.  $E_{\max}$  es la energía máxima del electrón permitida por conservación de la energía. Los puntos sucesivos corresponden a incrementos de 10 eV hasta 3 keV. El cruce de las líneas continuas delgadas negras, indica el origen del par de vórtices cuánticos, a una energía del electrón de aproximadamente 265 eV. En azul se representa el vórtice que se corresponde con el mínimo encontrado por Brauner y Briggs en 1991, el cual tiende a  $E/E_{\max} = 0.5$  para energías de impacto grandes. En naranja vemos su compañero de circulación opuesta el cual se aproxima rápidamente a  $E/E_{\max} = 0$  a medida que aumenta la energía. En violeta se marca el vórtice descrito en el capítulo 5, que tiende a  $E/E_{\max} = 0.5$  para energías de impacto grandes al igual que el marcado en azul, si bien su convergencia es más lenta que la de éste.



**Figura 5.11:** Evolución de la energía  $E$  (izquierda) y el ángulo  $\theta$  (derecha) a la cual se encuentran los vórtices cuánticos en función de la energía de impacto del positrón:  $v^2/2$  (siendo  $v$  la velocidad de impacto del proyectil). En líneas de trazos en gris se indican las asíntotas a las que tienden los mismos. El código de colores es el mismo que el de la figura 5.10.



**Figura 5.12:** Como la figura 5.6 pero para una energía de impacto de  $E = 10$  keV.

El procedimiento a llevarse a cabo consiste en realizar cálculos del elemento de matriz para diferentes valores de  $(\Theta - \theta)$  en el rango  $[-\pi/2, \pi/2] = [-90^\circ, 90^\circ]$ . El módulo del momento del positrón está fijo para cada elección del ángulo debido la conservación de energía y momento, y a encontrarnos en la condición coplanar, para la cual  $\Phi = \phi$ , siendo  $\Phi$  y  $\phi$  los ángulos azimutales del positrón y el electrón respectivamente. Esta tarea demanda mucho tiempo de cálculo y análisis de datos, ya que el tiempo requerido para obtener el elemento de matriz se multiplica por la cantidad de puntos de la coordenada  $(\Theta - \theta)$  que se desee obtener para cada energía de impacto. Por este motivo, elegimos realizar nuestra descripción a una energía de impacto de  $275 \text{ eV}$ . Ésta resulta interesante ya que en su elemento de matriz se manifiestan tres vórtices cuánticos (ver figura 5.8), y lo hacen a una energía lo suficientemente baja como para ser eventualmente medidos.

En la figura 5.13 vemos una línea obtenida mediante el procedimiento mencionado en el párrafo anterior, calculando los ceros del elemento de matriz en el rango  $(\Theta - \theta) \in [-0.3, 0.5] \approx [-20^\circ, 30^\circ]$ . Allí se puede ver claramente que lo que inicialmente fue interpretado como tres vórtices distintos [17, 18], en realidad componen una sola estructura[19], una *línea de vorticidad*<sup>8</sup>. Tal como fuera propiamente analizado por Dirac en su famoso trabajo de 1931 [59], en el cual su propósito era muy distinto<sup>9</sup>, las líneas de vorticidad en tres dimensiones pueden ser de dos tipos: anillos o líneas cuyos extremos se extienden hasta el infinito. La naturaleza de estas estructuras fue estudiada con más profundidad recientemente por Bialynicki-Birula *et al* [60], quienes proponen diversas maneras en que las estructuras vorticales pueden evolucionar unas en otras y fusionarse entre sí. Basados en este último análisis, una posible explicación para la emergencia del vórtice a un ángulo  $\theta \approx \pi/8$  (en violeta en la figura 5.11), podría ser que el mismo emerja como una línea, de la cual sólo vemos un punto al intersecarlo por la condición de colinealidad. Luego, a medida que va incrementándose la energía, el mismo podría interactuar con un anillo de vorticidad<sup>10</sup>, tal como se muestra esquemáticamente en la figura 5.14. En la misma se plantea un escenario en el cual, a partir de cierto punto (que podría ser la energía de  $265 \text{ eV}$  a la cual aparece el par de vórtices emparejados), se forma una sola estructura vortical entre un anillo y un vórtice lineal.

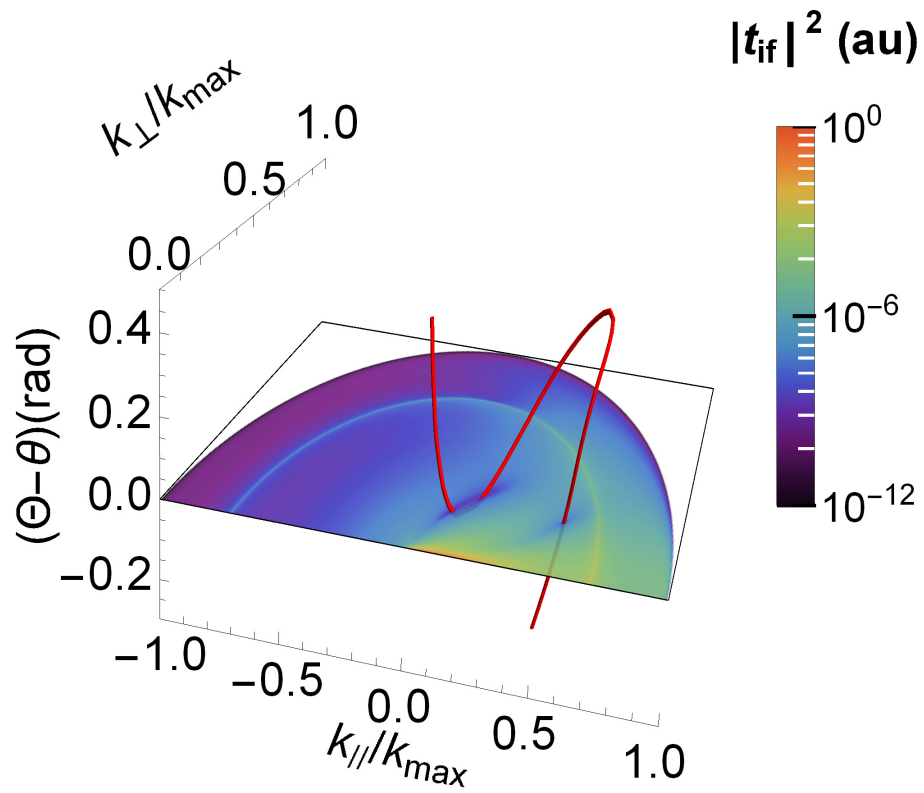
#### 5.4.1. Anillo de vorticidad

Recientemente pudimos completar el cálculo completo del vórtice, el cual se muestra en la figura 5.15. Allí se puede apreciar que la estructura vortical no es un anillo

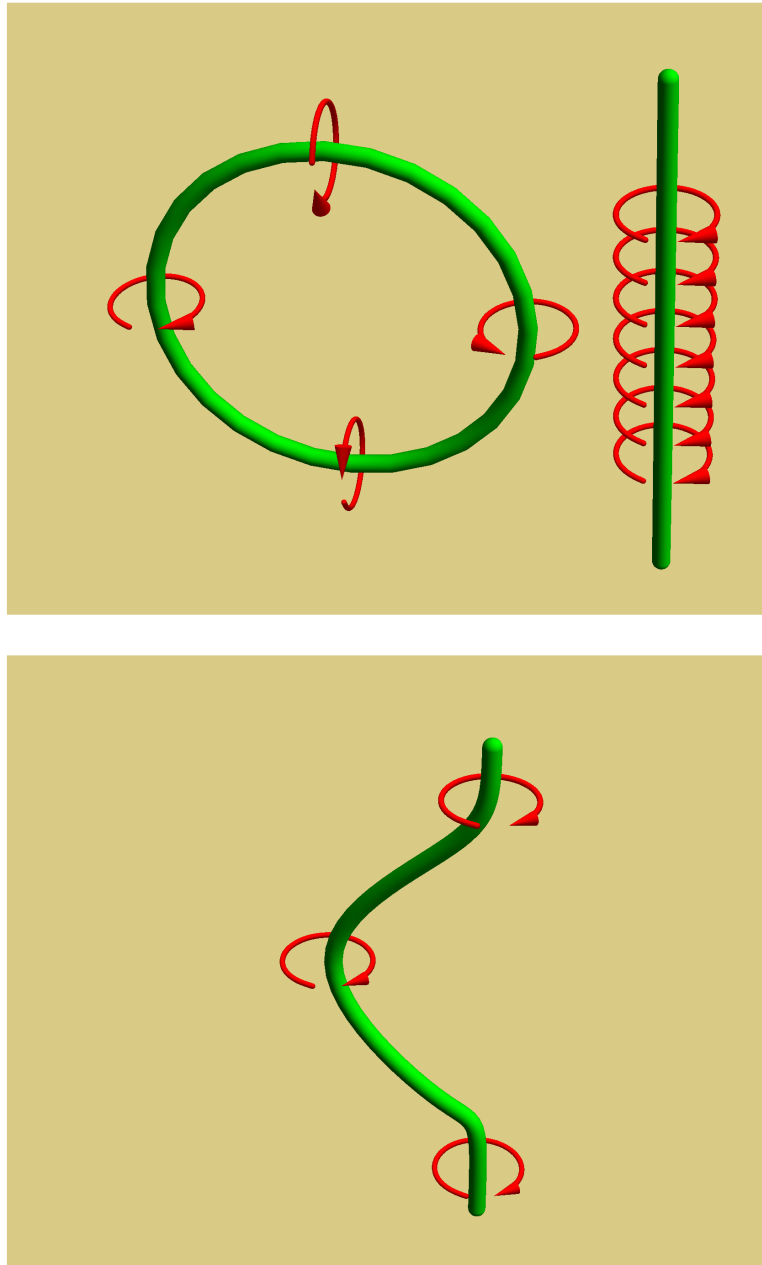
<sup>8</sup>También conocida como *vortex line* en inglés.

<sup>9</sup>Dirac intentaba dar un marco teórico a la existencia de monopolos magnéticos, entes físicos que hoy en día la mayor parte de la comunidad científica descarta.

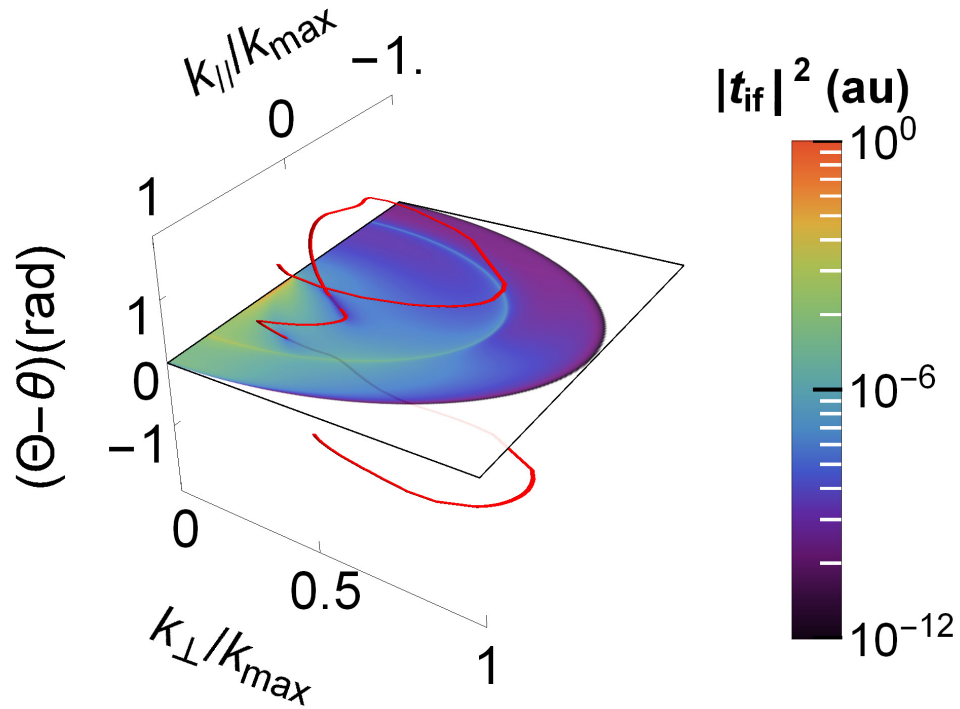
<sup>10</sup>El cual podría de hecho estar presente a menores energías, pero permanecer oculto al no ser intersecado por la condición de colinealidad.



**Figura 5.13:** Línea de vórtices del elemento de matrix  $t_{if}$  para la ionización de H por impacto de positrones a 275 eV.  $k_{//}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}$  paralela y perpendicular a la dirección de incidencia del positrón.  $\Theta$  y  $\theta$  son los ángulos polares del positrón y el electrón, respectivamente. La gráfica de intensidades muestra el módulo cuadrado de  $t_{if}$  en geometría colineal.



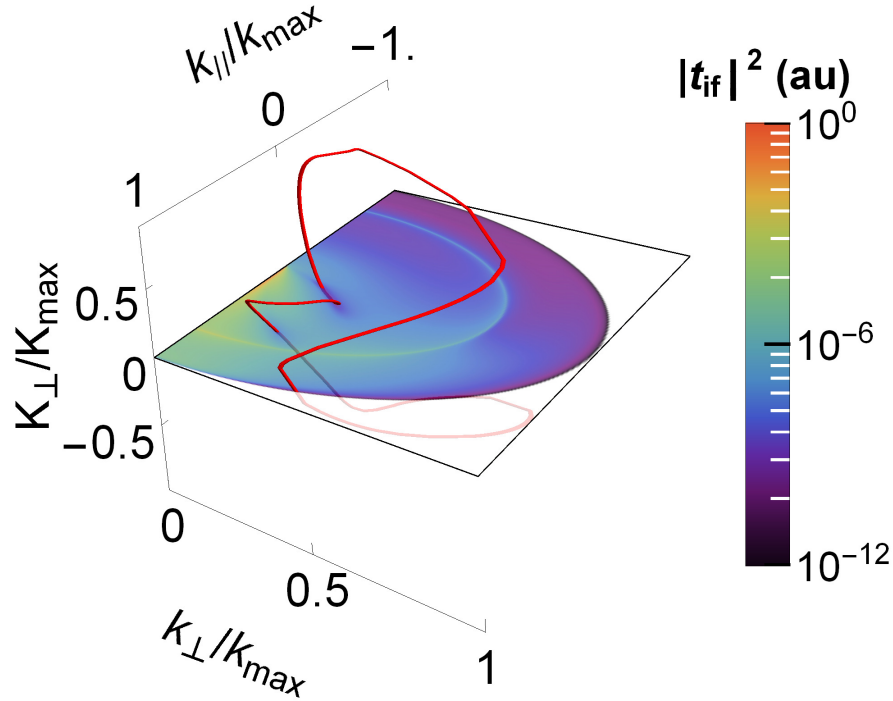
**Figura 5.14:** En el esquema superior vemos un anillo de vorticidad muy próximo a una línea de vorticidad. En el inferior vemos cómo ambas estructuras se podrían fusionar para generar una sola.



**Figura 5.15:** Línea de vórtices del elemento de matrix  $t_{if}$  para la ionización de H por impacto de positrones a 275 eV.  $k_{//}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}$  paralela y perpendicular a la dirección de incidencia del positrón.  $\Theta$  y  $\theta$  son los ángulos polares del positrón y el electrón, respectivamente. La gráfica de intensidades muestra el módulo cuadrado de  $t_{if}$  en geometría colineal.

cerrado, pero tampoco una línea que se extiende hasta el infinito. Tiene en principio la apariencia de un segmento que emerge y termina en el borde  $|\mathbf{k}| = k = k_{max}$ . Si tenemos en cuenta que debido a la conservación de la energía-momento, para este valor del módulo del momento del electrón el valor del módulo del momento del positrón es nulo, podremos ver que esta estructura representada en función de alguna de las componentes del momento  $\mathbf{K}$  del positrón debe ser cerrada en ese borde, ya que ambos extremos colapsan en uno. Ésta sería la explicación de porqué el vórtice que se origina a 60 eV pareciera emerger sin un compañero de circulación opuesta cuando se lo observa en la geometría colineal. Su compañero estaría enmascarado por el límite cinemático del espacio de momentos del electrón, al cual el anillo de vorticidad toca tangencialmente. A partir de este análisis, en la figura 5.16 graficamos entonces el vórtice en el espacio



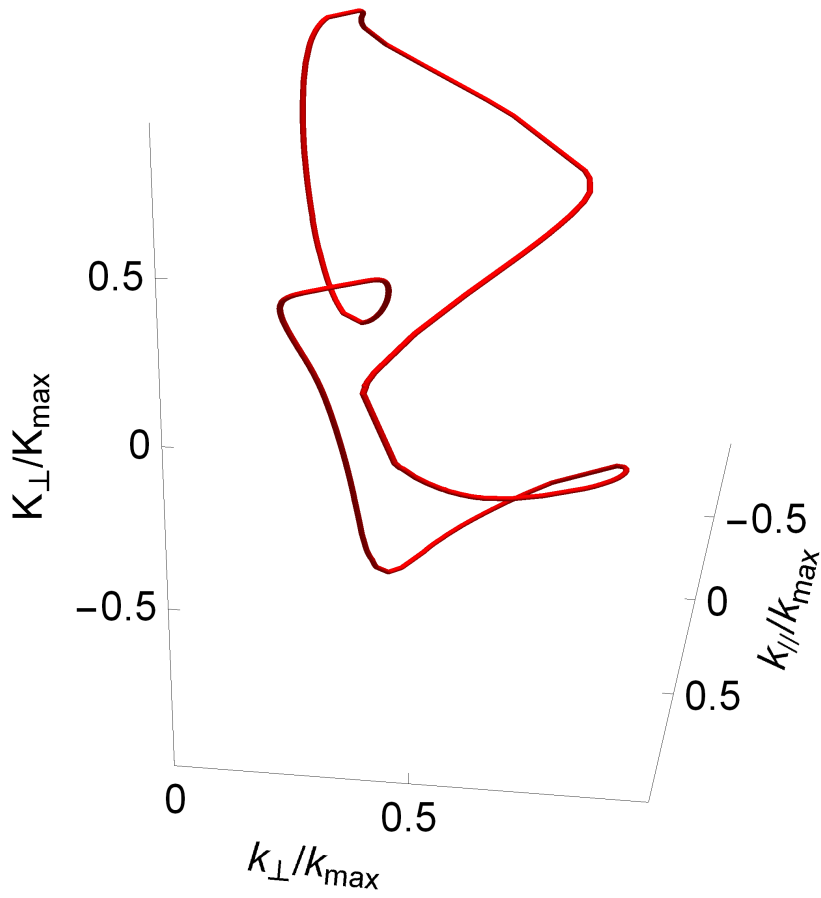


**Figura 5.16:** Línea de vórtices del elemento de matrix  $t_{if}$  para la ionización de H por impacto de positrones a 275 eV.  $k_{//}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}$  paralela y perpendicular a la dirección de incidencia del positrón.  $K_{\perp}$  es la componente del momento final del positrón, perpendicular a su dirección inicial, la misma está normalizada por el momento máximo  $K_{max}$  que puede adquirir el mismo debido a la conservación de energía y momento. La gráfica de intensidades muestra el módulo cuadrado de  $t_{if}$  en geometría colineal.

$k_{//}$ ,  $k_{\perp}$ ,  $K_{\perp}$ , y vimos que de hecho se obtiene un anillo de vorticidad<sup>11</sup>. Finalmente en la figura 5.17, graficamos solamente el anillo de vorticidad para que se pueda apreciar mejor su estructura cerrada.

A partir del análisis realizado en esta sección, podemos concluir que los vórtices que aparecen en colisiones de ionización de átomos y moléculas por impacto de positrones deben ser estructuras cerradas. Hecho que será motivo de una futura publicación.

<sup>11</sup>Representamos el momento del positrón normalizado por el momento máximo  $K_{max}$  que puede adquirir. Su valor es igual a  $k_{max}$  debido a que ambas partículas poseen igual masa.



**Figura 5.17:** Línea de vórtices del elemento de matrix  $t_{if}$  para la ionización de H por impacto de positrones a 275 eV.  $k_{\parallel}$  y  $k_{\perp}$  son las componentes del momento del electrón  $\mathbf{k}$  paralela y perpendicular a la dirección de incidencia del positrón.  $K_{\perp}$  es la componente del momento final del positrón, perpendicular a su dirección inicial, la misma está normalizada por el momento máximo  $K_{\max}$  que puede adquirir el mismo debido a la conservación de energía y momento.

# Conclusiones

En esta tesis abordamos el análisis de la ionización simple de átomos y moléculas por impacto de positrones. Tratamos el problema como uno de tres cuerpos constituido por un proyectil positrónico y un blanco hidrogenoide. Se obtuvieron resultados desde dos puntos de vista distintos, el clásico y el cuántico.

Pudimos analizar primero el aspecto clásico del problema, mediante el método de trayectorias clásicas de Monte-Carlo, con el cual se resolvieron de manera numérica las ecuaciones de movimiento. Los resultados obtenidos nos sirvieron para comprobar la presencia de estructuras conocidas en la sección eficaz, como así también del fenómeno de orientación, cuya novedad consiste en el favorecimiento de la condición en la cual el positrón y el electrón proveniente del núcleo ionizado escapan de la colisión de manera tal que este último se ubica entre el blanco ionizado y el proyectil al final de la colisión. Además, realizando un estudio de la colisión en el espacio de momentos del ion en retroceso se pudo concluir que este fenómeno implica que el ángulo que forman los momentos del electrón y el positrón sea pequeño. La determinación experimental de este fenómeno no ha sido lograda aún, pero gracias al avance de los microscopios de reacción para positrones, podría llegar a estar próximo a concretarse. Además, al estudiar el problema en condición de colinealidad, se elucidó la presencia de un mecanismo clásico de doble colisión binaria conocido como mecanismo de Thomas, lo cual motivó el estudio cuántico del problema bajo esta condición.

Luego realizamos el estudio cuántico de la colisión en condición de colinealidad, mediante un método de onda distorsionada del continuo. Se obtuvieron secciones eficaces en las cuales se pudieron observar las estructuras conocidas en la literatura, pero también un mínimo muy pronunciado. Debido a que la ubicación del Mecanismo de Thomas analizado en el caso clásico no coincidía con la de este mínimo, se intentó una explicación para el mismo mediante otro mecanismo clásico, el cual considera que el electrón se ubica en un punto de ensilladura del potencial generado por el positrón y el núcleo ionizado, aunque tampoco resultó completamente satisfactorio. Debido a esto, optamos por abordar el problema por medio de una formulación alternativa de la mecánica cuántica, la mecánica bohmiana, la cual había sido utilizada para interpretar la presencia de estructuras similares, pero en la ionización con electrones y protones

como proyectil.

La mecánica bohmiana constituyó una poderosa herramienta interpretativa en nuestro trabajo, posibilitándonos determinar la presencia de novedosas estructuras denominadas vórtices cuánticos en reacciones positrónicas, los cuales son fáciles de comprender en términos de esta teoría. Un hecho que se deduce de manera sencilla y natural en el marco de esta formulación de la mecánica cuántica, es la aparición de los vórtices cuánticos de a pares de circulación opuesta, hecho por otro lado completamente imprevisto en la denominada interpretación de Copenhague. A partir de esta predicción, decidimos orientar nuestra investigación a la búsqueda de pares de vórtices cuánticos, pudiendo determinar su aparición para energías bajas de impacto de positrones, hecho que haría factible su determinación experimental, ya que a medida que disminuye la energía de impacto del proyectil, se incrementa el valor de la sección eficaz.

El éxito en determinar la energía de impacto a la cual emergen pares de vórtices cuánticos, nos motivó a realizar una descripción completa de su aparición y evolución en el espacio de momentos para un amplio rango de energías de incidencia del proyectil. En una comunicación de nuestro grupo con la Dra. Gaetana Laricchia, de la división de Física Atómica, Molecular, Óptica y Positrónica, del University College de Londres, nos comentó que uno de los primeros objetivos que se han trazado luego de la puesta en marcha de su nuevo microscopio de reacción positrónico, es la determinación de la presencia de vórtices cuánticos en la ionización de hidrógeno atómico y molecular, y helio. Esto representaría un gran paso en la confirmación de nuestras hipótesis.

Luego de realizar un análisis teórico completo de la aparición de los vórtices cuánticos en función de la energía de impacto del positrón, nos propusimos describirlos en una dimensionalidad mayor, es decir, relajando la restricción geométrica que supone la condición de colinealidad. Este estudio nos reveló de manera sorprendente que los vórtices cuánticos en reacciones positrónicas componen una única estructura cerrada, denominada anillo de vorticidad, de la cual bajo la restricción de la colinealidad sólo se aprecian cortes, representados como puntos aislados entre sí en el espacio de momentos del electrón.

# Apéndice A

## Unidades Atómicas

En física atómica se utiliza un sistema que toma como unidades básicas la masa y carga del electrón, y el radio y período orbital del estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

masa	$1u.a. = m$	masa del electrón
carga	$1u.a. = e$	carga del electrón
longitud	$1u.a. = a_o = \hbar^2/me^2$	radio de Bohr
tiempo	$1u.a. = a_o/\alpha c$	

Las unidades derivadas más utilizadas son

velocidad	$1u.a. = \alpha c = e^2/\hbar$
energía	$1u.a. = 2Ry = me^4/\hbar^2$

donde  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137.036$  es la constante de estructura fina, y el Rydberg  $Ry$  es la energía de ligadura del estado fundamental del átomo de Hidrógeno,  $1Ry = 13.6058eV$ . En la siguiente tabla se indican algunas de las constantes más utilizadas en física

---

atómica en unidades atómicas y en el sistema CGS<sup>1</sup> :

	unidades atómicas	CGS
$\hbar$ (constante reducida de Planck)	1	$1.05459 \times 10^{-27} \text{erg.s}$
$h$ (constante de Planck)	$2\pi$	$6.6262 \times 10^{-27} \text{erg.s}$
$m$ (masa del electrón)	1	$9.1095 \times 10^{-28} \text{g}$
$e$ (carga del electrón)	1	$5.34593 \times 10^{-29} \text{Fr}$
$a_0$ (radio de Bohr)	1	$5.29177 \times 10^{-9} \text{cm}$
$Ry$ (constante de Rydberg)	$1/2$	$2.1799 \times 10^{-11} \text{erg}$
$M$ (masa del protón)	1836.152	$1.67261 \times 10^{-24} \text{g}$
$c$ (velocidad de la luz)	137.036	$2.997925 \times 10^{10} \text{cm/s}$

En general, la energía se mide en términos de una unidad denominada *electron-voltio*, eV . Esta es la energía adquirida por un electrón acelerado en un campo electrostático de un voltio de intensidad. Una unidad atómica de energía equivale a  $27.2113845 \text{ eV}$ .

---

<sup>1</sup>El cual es un sistema de unidades basado en el centímetro (cm), el gramo (g) y el segundo(s). Para la energía se utiliza el ergio (erg), y para la carga el estatcoulombio o Franklin (Fr).

## Apéndice B

# Desde la física de fluidos hacia la mecánica cuántica

La equivalencia entre la física de fluidos y la ecuación de Schrödinger, fue realizada por *Madelung* en 1926[49], y retomada por *Takabayashi* en 1952[50]. En este paralelismo, la función de ondas representa un flujo irrotacional debido a la definición 4.3 del campo de velocidades, y además compresible, ya que su densidad no es necesariamente constante.

Consideremos la ecuación de Euler para el movimiento de un fluido con un campo de velocidades  $\mathbf{u}$  [64]:

$$m \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla \left( V + \int \rho^{-1} dp_r \right) , \quad (\text{B.1})$$

donde  $V/m$  es el potencial externo por unidad de masa,  $\rho$  es la densidad del fluido por unidad de masa, considerada como función de la presión (es decir que el fluido es compresible). Este fluido obedecerá a su vez la siguiente ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 . \quad (\text{B.2})$$

Si sustituimos nuestro potencial:  $V_Q[\rho(\mathbf{r})] = -\frac{1}{2m} \frac{\Delta R}{R}$  por el potencial de presión dependiente de la densidad:  $V_p[\rho(\mathbf{r})] = \int \rho^{-1} dp_r$ , la ecuación de Euler queda:

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = m \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla \left( V - \frac{1}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right) . \quad (\text{B.3})$$

Los flujos que se desarrollan bajo este tipo de potenciales escalares se mantienen irrotacionales si inicialmente lo son, por lo tanto podemos restringir nuestro análisis a este tipo de flujos, que son los que nos interesan. De este modo, el campo de velocidades del flujo se puede obtener como el gradiente de un potencial escalar por unidad de masa

$S/m$ , del siguiente modo:

$$\mathbf{u} = \nabla S/m . \quad (\text{B.4})$$

La ecuación (B.3) , una vez integrada, se reduce a:

$$\frac{\partial S}{\partial t} - \frac{1}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} + V + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 . \quad (\text{B.5})$$

Ahora, las ecuaciones (B.2) y (B.5) lucen exactamente iguales a las ecuaciones 4.7 y 4.2. Esto significa que la función de ondas que se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger, puede representarse como un fluido irrotacional compresible con un potencial de presión particular (el potencial cuántico). Este potencial difiere de los ordinarios que encontramos en la física de fluidos clásica y genera formas inusuales de flujo tales como son la interferencia, el efecto túnel, y todos los propios de la mecánica cuántica no relativista [42].



# Bibliografía

- [1] Surko, C. M., Gribakin, G. F., Buckman, S. J. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **38**, R57, 2005.
- [2] Falke, T., Brandt, T., Kuhl, O., Raith, W., Weber, M. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **30**, 3247, 1997.
- [3] Laricchia, G., Armitage, S., Kövér, A., Murtagh, D. J. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, **56**, 1, 2008.
- [4] Williams, A. I., Kövér, A., Murtagh, D. J., Laricchia, G. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **199**, 012025, 2010.
- [5] Mueller, D. W., Lee, C., Vermet, C., Armitage, S., Slaughter, S., Hargrave, L., *et al.* *Bulletin of the American Physical Society, 43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics*, **57**, (5), 2012.
- [6] Kövér, A., Laricchia, G. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 5309, 1998.
- [7] Fiol, J., Barrachina, R. O. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **44**, 075205, 2011.
- [8] Barrachina, R. O., Fiol, J. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **45**, 065202, 2012.
- [9] Barrachina, R. O., Delesque, A., Tricard, R., Navarrete, F. O., Della Picca, R., Fiol, J., *et al.* *63rd Gaseous Electronic Conference and 7th International Conference on Reactive Plasmas, Conference Proceedings*, págs. KWP–111, 2010.
- [10] Navarrete, F., Della Picca, R., Fiol, J., Barrachina, R. O. *XVI International Workshop on Low Energy Positron and Positronium Physics*, pág. 69, 2011.
- [11] Cheshire, I. M. *Proc. Phys. Soc.*, **84** (1), 89, 1964.
- [12] Gayet, R. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **5** (3), 483, 1972.
- [13] Rivarola, R. D., Miraglia, J. E. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **15** (14), 2221, 1982.
- [14] Dürr, D., Teufel, S. *Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory*. Berlin: Springer-Verlag, 2009.

- 
- [15] Macek, J. H., Sternberg, J. B., Ovchinnikov, S. Y., Lee, T. G., Briggs, J. S. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 143201, 2009.
- [16] Macek, J. H., Sternberg, J. B., Ovchinnikov, S. Y., Briggs, J. S. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 033201, 2010.
- [17] Navarrete, F., Della Picca, R., Fiol, J., Barrachina, R. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **46** (11), 2013.
- [18] Navarrete, F., Barrachina, R. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **48** (5), 2015.
- [19] Navarrete, F., Barrachina, R. *Nucl. Instrum. Methods. B*, **369**, 72–76, 2016.
- [20] Abrines, P., Percival, I. C. *Proc. Phys. Soc*, **88**, 861, 1966.
- [21] Lewartowski, E., Courbin, C. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **25**, L63, 1992.
- [22] Bandarage, G., Parson, R. *Phys. Rev. A*, **41**, 5878, 1990.
- [23] Fiol, J., Courbin, C., Rodríguez, V. D., Barrachina, R. O. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **33**, 5343, 2000.
- [24] Valtonen, M., Karttunen, H. *The Three-Body Problem*. 3<sup>a</sup> ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [25] Macek, J. H., Shakeshaft, R. *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 1441, 2009.
- [26] Goldstein, P. C., H., Safko, J. *Classical Mechanics*. 3<sup>a</sup> ed. Reading, Massachusetts: Addison Wesley, 2001.
- [27] Bulirsch, R., Stoer, J. *Num. Math.*, **1**, 66, 1966.
- [28] Fiol, J., Olson, R. E. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **35**, 1173, 2002.
- [29] Barrachina, R. O., Courbin, C. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **35**, 3157, 2002.
- [30] Baier, R., Kühnelt, H., Urban, P. *Nucl. Phys. B*, **11**, 675, 1969.
- [31] Malcolm, G. *Multidisciplinary Approaches To Visual Representations And Interpretations*. Ámsterdam: Elsevier, 2004.
- [32] Pauwels, L. *Visual Cultures of Science: Rethinking Representational Practices in Knowledge Building And Science Communication Interfaces*. Lebanon, NH: University Press of New England, 2006.
- [33] Lim, K. L., McCarthy, I. E. *Nucl. Phys.*, **88**, 433, 1966.
- [34] Gottschalk, B., Shlaer, W. J., Wang, K. H. *Phys. Lett.*, **16**, 294, 1965.

- [35] Barrachina, R. O., Fiol, J. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **199**, 012022, 2010.
- [36] Barrachina, R., Fiol, J., Navarrete, F. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **388**, 2012.
- [37] Briggs, J., Day, M. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **13** (24), 4797–4810, 1980.
- [38] Rodríguez, V., Wang, Y., Lin, C. *Phys. Rev. A*, **52**, R9–R12, 1995.
- [39] Macek, J. H. *Phys. Rev. A*, **1**, 235, 1970.
- [40] Barrachina, R. O. *Nucl. Instrum. Methods. B*, **124**, 198–205, 1997.
- [41] Brauner, M., Briggs, J. S. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **24**, 2227, 1991.
- [42] Gasiorowicz, S. Quantum Physics. 3<sup>a</sup> ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2003.
- [43] Taylor, J. R. Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 1972.
- [44] Garibotti, C. R., Miraglia, J. E. *Phys. Rev. A*, **21**, 572, 1980.
- [45] Laricchia, G., Armitage, S., Kövér, A., Murtagh, D. J. Ionizing collisions by positrons and positronium impact on the inert atoms. En: Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics, tomo 56, pág. 3. Academic Press, Inc., 2009.
- [46] Barrachina, R. O., Ponce, V. Teoría de Colisiones. 1<sup>a</sup> ed. Alicante: Universidad de Alicante, 1994.
- [47] Della Picca, R., Fiol, J., Barrachina, R. O. *8th Workshop on Fast Ion - Atom Collisions*, 2004.
- [48] Holland, P. R. Quantum Theory of Motion. 1<sup>a</sup> ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
- [49] Madelung, E. *Z. Phys*, **40**, 332, 1926.
- [50] Takabayashi, T. *Prog. Theor. Phys.*, **08** (2), 143, 1952.
- [51] Marsden, J. E. Vector Calculus. 3<sup>a</sup> ed. Hoboken, New Jersey: Addison-Wesley, 1988.
- [52] Macek, J. Dynamical Processes In Atomic And Molecular Physics. 1<sup>a</sup> ed. Beijing: Bentham Science Publishers, 2012.
- [53] Ovchinnikov, S. Y., Sternberg, J. B., Macek, J. H., Lee, T. G., Schultz, D. R. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 203005, 2010.

- 
- [54] Ovchinnikov, S. Y., Macek, J. H., Schmidt, L. P. H., Schultz, D. R. *Phys. Rev. A*, **83**, 060701, 2011.
- [55] Macek, J. H. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **212** (1), 012008, 2010.
- [56] Dollard, J. D. *Rocky Mountain J. Math.*, **1**, 5–88, 1971.
- [57] Navarrete, B. R., F. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **635** (5), 2015.
- [58] Navarrete, F., Feole, M., Barrachina, R., Kövér, A. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **583**, 2015.
- [59] Dirac, P. A. M. *Proc. R. Soc. A*, **133**, 60, 1931.
- [60] Bialynicki-Birula, I., Bialinicka-Birula, Z., Sliwa, C. *Phys. Rev. A*, **61**, 321101, 2000.
- [61] Thomas, L. H. *Proc. R. Soc. A*, **114**, 561, 1927.
- [62] Fiol, J., Rodríguez, V. D., Barrachina, R. O. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **34**, 933, 2001.
- [63] Fiol, J., Rodríguez, V. D., Barrachina, R. O. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **35**, 149, 2002.
- [64] Kundu, P. K., Cohen, I. M. *Fluid Mechanics*. 4<sup>a</sup> ed. Ámsterdam: Elsevier, 2008.

# Artículos publicados durante la tesis

1. Barrachina, R.O., Fiol, J., Navarrete, F.O. Positron-impact ionization studied by means of Recoil-Ion momentum distributions, *Journal of Physics: Conference Series*, **388**, 072019, 2012.
2. Navarrete, F., Picca, R.D., Fiol, J., Barrachina, R.O. Vortices in ionization collisions by positron impact, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **46**, 115203, 2013.
3. Fabre, I., Navarrete, F., Sarkadi, L. y Barrachina, R.O. Projectile coherence: The Van Cittert - Zernike theorem revisited, *Journal of Physics: Conference Series*, **635**, 042003, 2015.
4. Navarrete, F. y Barrachina, R.O. Vortex lines and surfaces in positron-atom ionization collisions, *Journal of Physics: Conference Series*, **635**, 052014, 2015.
5. Navarrete, F., Feole, M., Barrachina, R.O. y Kövér, Á. When vortices and cusps meet, *Journal of Physics: Conference Series*, **583**, 012026, 2015.
6. Gervasoni, J.L., Barrachina, R.O., Segui, S. y Navarrete, F. Asymmetry in the excitation of plasmons by swift particles traversing a surface at oblique incidence, *Journal of Physics: Conference Series*, **635**, 062009, 2015.
7. Navarrete, F. y Barrachina, R.O. Vortices in the three-body electron-positron-proton continuum system induced by the positron-impact ionization of hydrogen, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **48**, 055201, 2015.
8. Navarrete, F. y Barrachina, R.O. Vortices in ionization collisions, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **369**, 72-76, 2016.
9. Sarkadi, L., Fabre, I., Navarrete, F. y Barrachina, R.O. Loss of wave-packet coherence in ion-atom collisions, *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **93**, 032702, 2016.

# Agradecimientos

A Raúl Barrachina y Juan Fiol por su contribución invaluable en mi formación profesional. Aprender a hacer ciencia no es una labor sencilla, y haber podido contar con su guía y su ejemplo, me ayudó a dar pasos firmes en el comienzo de mi desempeño científico.

A Alejandra por estar a mi lado en esta etapa importante de mi vida, alentándome y teniéndome paciencia en esos momentos en que el camino se hace cuesta arriba. Su amor es mi gran fuente de inspiración.

A mis viejos, Francisco e Irma, por inculcarme lo valioso del conocimiento, y apoyarme durante mi carrera en todos los sentidos. Son dos personas ejemplares a las cuales les debo cada pequeño o gran logro en mi vida.

A Naty, mi hermana, que siempre está pendiente de mis alegrías y tristezas, escuchándome y dándome muy buenos consejos en cada ocasión. La familia hermosa que ha formado con mi querido cuñado Maxi, y mi ahijado adorado, Nino, me llenan de alegría el corazón.

A los amigos que he ido juntando en las distintas etapas de mi vida, porque desde la distancia o la cotidianeidad, me han bancado en los momentos difíciles, y han compartido mis alegrías como propias.

A Flavio Colavecchia, quien fue el revisor de esta tesis e hizo observaciones acerca de la misma que contribuyeron a que se enriqueciera en muchos sentidos.

A los jurados por enorgullecerme aceptando el compromiso de evaluar mi trabajo y permitirme ampliar mi conocimiento compartiendo su punto de vista.

Al Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad de Cuyo, instituciones sin las cuales este trabajo no sería posible, y cuyo personal se encarga de mantener la educación y la ciencia en la Argentina al nivel más alto.